

DOI: 10.11779/CJGE20230754

基于精确缩尺和粗粒化的颗粒材料 FDEM 模拟方法

汪泾周¹, 马 刚^{*1,2,3}, 赵婷婷⁴, 张文字¹, 胡锦方², 周 伟^{1,2,3}

(1. 武汉大学水资源工程与调度全国重点实验室, 湖北 武汉 430072; 2. 武汉大学水工程科学研究院, 湖北 武汉 430072; 3. 武汉大学水工岩石力学教育部重点实验室, 湖北 武汉 430072; 4. 太原理工大学机械与运载工程学院, 山西 太原 030024)

摘要: 颗粒材料具有非连续、离散性等特征, 在进行数值模拟时面临着较大的计算压力。通过将精确缩尺准则和粗粒化方法引入到连续-离散耦合 (combined finite-discrete element method, FDEM) 方法中, 旨在为加速基于 FDEM 的颗粒材料数值模拟提供一种解决方案。基于精确缩尺和粗粒化等理论, 推导了 FDEM 中应遵循的精确缩尺准则, 在此基础上分别进行了等粒径颗粒体系及二元颗粒体系的三轴剪切数值试验。试验结果表明, 在未引入精确缩尺准则时, 粗粒化模型表现的力学响应特征会发生改变, 结果出现失真, 因此必须对粗粒化模型参数进行修正。引入精确缩尺准则后, 粗粒化模型的力学响应特征会得到补正。试验结果论证了 FDEM 引入精确缩尺准则和粗粒化方法的有效性, 即能在近似原始颗粒体系的条件下大幅度提升采用 FDEM 进行颗粒材料数值模拟的计算效率。基于数值试验结果进行了宏细观力学分析, 宏观应力变形和细观接触力相互印证, 揭示了精确缩尺和粗粒化方法的细观力学机理。

关键词: 颗粒材料; 连续-离散耦合分析方法; 精确缩尺; 粗粒化; 计算效率

中图分类号: TU43 文献标识码: A 文章编号: 1000-4548(2024)11-2371-09

作者简介: 汪泾周(2000—), 男, 博士研究生, 主要从事颗粒材料计算力学方面的研究工作。E-mail: Andrewwang@whu.edu.cn。

FDEM simulation for granular materials based on exact scaling and coarse granulation

WANG Jingzhou¹, MA Gang^{1, 2, 3}, ZHAO Tingting⁴, ZHANG Wenyu¹, HU Jinfang², ZHOU Wei^{1, 2, 3}

(1. State Key Laboratory of Water Resources Engineering and Management, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 2. Institute of Water Engineering Sciences, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 3. Key Laboratory of Rock Mechanics in Hydraulic Structural Engineering of the Ministry of Education, Wuhan University, Wuhan 430072, China; 4. College of Mechanical and Vehicle Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: The particle materials are characterized by discontinuity and dispersion, so they face great computational pressure in numerical simulation. The exact scaling criterion and coarse-grained method are introduced into the combined finite-discrete element method (FDEM) to provide a solution for accelerating the numerical simulation of granular materials based on the FDEM. Based on the theories of exact scaling and coarse granulation, the exact scaling criteria for the FDEM are derived. On this basis, the numerical triaxial shear tests for equal diameter particle system and binary particle system are carried out respectively. The test results show that without the introduction of the exact scaling criteria, the mechanical response characteristics of the coarse-grained model will change, resulting in distortion, and the parameters of the coarse-grained model need to be corrected. After the introduction of the exact scaling criteria, the mechanical response characteristics of the coarse-grained model are corrected. The test results demonstrate the effectiveness of introducing the exact scaling criteria and coarse granulation method into the FDEM. It can greatly improve the computational efficiency of numerical simulation of granular materials using the FDEM under the similar conditions to the original particle system. Based on the numerical test results, the macroscopic stress deformation and mesoscopic contact force are correlated, and the micromechanical mechanism of the exact scaling and coarse-grained methods is revealed.

Key words: granular material; FDEM; exact scaling; coarse granulation; computational efficiency

基金项目: 国家重点研发计划项目课题 (2022YFC3005503); 国家自然科学基金项目 (52322907, 52179141); 湖北省自然科学基金项目 (2022CFD030); 中国电建集团成都勘测设计研究院有限公司资助项目 (CD2C20220155)

收稿日期: 2023-08-07

*通信作者 (E-mail: magang630@whu.edu.cn)

0 引言

颗粒材料广泛存在于自然界和工程界, 具有复杂

的力学特性^[1-2]。受限于颗粒材料非连续性、离散性等特点，基于连续域网格离散的有限元（finite element method, FEM）、有限差分（finite difference method, FDM）等数值方法往往难以完全反映其宏观力学特性，更不能从细观层面解释其应力变形的内在机制。离散单元法（discrete element method, DEM）的出现弥补了 FEM、FDM 等方法的不足，为颗粒材料的数值研究提供了一种重要手段，因而被广泛应用于颗粒材料复杂运动^[3]和力学特性^[4]等方面的研究中。为了还原更加真实的颗粒特征，研究者们还在 DEM 方法中引入了复杂颗粒形状^[5-6]和颗粒破碎^[7-10]。相比于 DEM 方法，在其基础上发展的连续-离散耦合分析（combined finite-discrete element method, FDEM）方法在颗粒材料模拟方面则有着更天然的优势。FDEM 方法不仅能通过接触计算再现颗粒材料的离散特性，还会对每个颗粒进行有限元网格离散，因而可以更自然地引入复杂形状和颗粒破碎^[11-17]。

然而，无论是 DEM 方法还是 FDEM 方法，在进行大规模颗粒材料的数值模拟时，颗粒间的复杂接触计算都会带来巨大的计算开销，面临高昂计算成本的问题，亟需能够提高计算效率的手段。在最近的研究中，提升 DEM 或者 FDEM 数值计算效率的方法可以分为两类：①基于硬件的加速策略，如采用 GPU 并行的手段来加速 FDEM 方法的计算效率^[18-19]，GPU 包含大量的计算单元，通过并行计算能够提升 FDEM 方法的数值模拟效率；②基于计算方法的加速策略，如采用粗粒化方法来降低颗粒系统的计算规模，以加快 DEM 模拟速度^[20-23]，粗粒化通过使用较少的大颗粒来替代大量的小颗粒，在保持颗粒材料离散属性的同时，能减少计算系统中的颗粒数量，从而降低计算规模，提升计算效率。

本文关注于第②种策略，将粗粒化的方法引入到 FDEM 方法的数值模拟中。在粗粒化方法中，大颗粒替代小颗粒会引起颗粒集合体接触关系的改变，因此需要对粗粒化模型的计算参数进行调整，使其能还原原始系统的宏观力学特性。一种直接的做法是通过细观参数标定的方式率定粗粒化参数，尽管这种方法能得到不错的模拟结果，但是缺乏理论指导和解释性，同时会增加参数标定的复杂度，提高参数标定的难度和成本。赵婷婷等^[21]给出了一种更一般性的粗粒化参数取定方案，即通过引入精确缩尺准则来指导粗粒化参数的取值。精确缩尺理论具有严格的理论推导过程，通过建立原始系统和缩尺系统之间的比例关系，能够使缩尺系统还原原始系统的物理属性^[21, 24-25]。

将这一思想引入到 FDEM 方法中，推导了采用基于罚函数线性接触模型 FDEM 方法的精确缩尺准则，

并结合宏细观 2 个方面解释了该方法作用的内在机理，为加速 FDEM 方法用于颗粒材料数值模拟提供了一种解决方案。

1 基本原理

1.1 FDEM 方法基本理论

FDEM 方法综合了 FEM 方法和 DEM 方法的特点，在颗粒与颗粒之间设置接触模型来计算接触力，在颗粒内部进行有限元网格离散来描述颗粒形态并计算颗粒变形^[26]。

在进行接触力计算时，本文采用考虑阻尼力的线性接触模型^[13-14]，同时，颗粒间接触服从库伦摩擦定律，即切向接触力 F_s 的最大值受限于法向接触力 F_n 和粒间摩擦系数 μ ，具体计算公式为

$$\left. \begin{aligned} F_n &= |k_n \delta_n - f_{vd}^n| , \\ F_s &= \min(|k_s \delta_s - f_{vd}^s|, \mu F_n) . \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

式中： F_n ， F_s 分别为法向和切向的接触力； k_n ， k_s 分别为法向和切向的接触刚度； δ_n 为接触面上法向的嵌入量； δ_s 为接触面上切向的相对位移量； μ 为粒间摩擦系数； f_{vd}^n ， f_{vd}^s 分别为法向和切向的阻尼力。

接触刚度通过罚函数定义，法向和切向接触刚度为

$$k_c = p_c A . \quad (2)$$

式中： k_c 为法向或切向的接触刚度； p_c 为相应方向的罚刚度； A 为顶点接触的控制面积。

阻尼力依据阻尼力定律计算，即

$$f_{vd} = 2\beta_c \sqrt{mk_c} v_r . \quad (3)$$

式中： f_{vd} 为法向或切向的阻尼力； β_c 为相应方向的阻尼系数； m 为节点质量； k_c 为相应方向的接触刚度； v_r 为接触处相应方向上的相对滑动速度。

在进行颗粒变形计算时，本文采用各向同性线弹性模型，具体计算公式可表达为

$$d\sigma_{ij} = \lambda d\varepsilon_v \delta_{ij} + 2G d\varepsilon_{ij} . \quad (4)$$

式中： $d\sigma_{ij}$ 为应力增量的分量； $d\varepsilon_v$ 为体积应变增量； $d\varepsilon_{ij}$ 为应变增量的分量； λ ， G 为拉梅系数，由弹性模量 E 和泊松比 ν 计算得到：

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= \frac{Ev}{(1+\nu)(1-2\nu)} , \\ G &= \frac{E}{2(1+\nu)} . \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

1.2 精确缩尺和粗粒化

精确缩尺方法采用等比例放大的方式来处理大规模颗粒系统的计算问题^[24-25]。该方法中，原始颗粒系统的计算区域和颗粒一起被放大到 h 倍，通过选取恰当的物理量建立精确缩尺准则，从而得到精确缩尺系

统。在精确缩尺准则的约束下, 精确缩尺系统能够较精确地再现原始颗粒系统的力学特性。

粗粒化方法采用等效替代的方式来处理大规模颗粒系统的计算效率问题^[21]。该方法中, 在不改变原始颗粒系统计算区域大小的前提下, 将原始颗粒系统中的颗粒按照一定的特征长度缩放比尺 h 放大, 达到用较少大颗粒替代大量小颗粒的目的。由于粗粒化后颗粒系统的计算规模显著降低, 可以大幅度提升计算效率, 但粗粒化系统中的颗粒数量等几何特征发生了明显的改变, 在力学特性上往往和原始颗粒系统存在一定的偏差, 需要进行参数的校正。

尽管精确缩尺和粗粒化是 2 种不同的方法, 但是, 分别由其建立的精确缩尺系统和粗粒化系统并非完全割裂。如图 1 所示, 精确缩尺系统和粗粒化系统均是对原始颗粒系统的放大, 区别在于计算区域的大小和精确缩尺准则的引入。将精确缩尺系统中建立的精确缩尺准则引入到粗粒化系统中, 则引入精确缩尺准则的粗粒化系统和精确缩尺系统互为局部与整体。

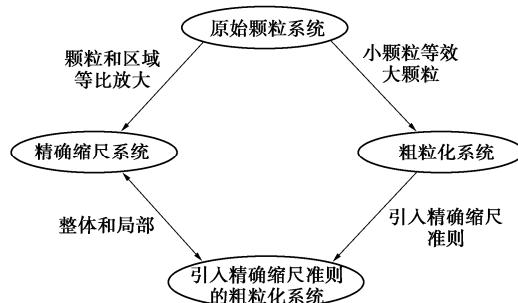


图 1 精确缩尺系统和粗粒化系统的关联性

Fig. 1 Relevance between exact scaling system and coarse-grained system

图 2 进一步阐述了引入精确缩尺准则的粗粒化系统及其与原始颗粒系统的关联性。对于一个近乎均质的原始颗粒系统, 将其按照特定缩放比尺进行放大可以分别建立粗粒化系统和精确缩尺系统, 粗粒化系统与原始颗粒系统力学特性存在差异, 而精确缩尺系统与原始颗粒系统力学特性却基本一致。将精确缩尺系统中应满足的精确缩尺准则施加到粗粒化系统之后, 可以建立引入精确缩尺准则的粗粒化系统, 该系统可视为精确缩尺系统的一个局部区域。当原始颗粒系统足够均质时, 由其建立的精确缩尺系统也是足够均质的, 因而整体和局部具有相近的力学特性。以精确缩尺系统为桥梁, 可以得出引入了精确缩尺准则的粗粒化系统能较精确地还原原始颗粒系统的宏观力学特性的结论。然而, 实际颗粒系统是各向异性的, 局部特征和整体特征存在一定差异, 因而引入精确缩尺准则的粗粒化系统表现出来的宏观力学特性仍会和精

确缩尺系统存在偏差, 但能够近似还原原始颗粒系统的宏观力学特性。

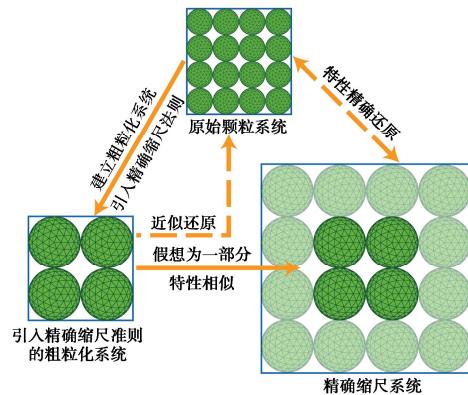


图 2 引入精确缩尺准则的粗粒化系统

Fig. 2 Coarse-grained system with exact scaling criteria

1.3 精确缩尺准则推导

依据量纲分析理论, 若只考虑颗粒间的机械运动, 则力学相关的物理量的量纲均能表示为国际标准单位制下的 3 个基本物理量量纲——长度 [L]、时间 [T] 和质量 [M] 的组合, 即对系统中任意力学相关的物理量 q , 其量纲 $[q]$ 可表示为

$$[q] = [L]^{\alpha} [T]^{\beta} [M]^{\gamma} \quad (6)$$

式中: α , β , γ 分别为长度、时间、质量量纲的指数。

在精确缩尺系统中, 可基于 3 个基本物理量的缩放比尺来确定该系统相对于原始颗粒系统完整的缩放法则。现假定精确缩尺系统和原始颗粒系统中 3 个基本物理量的缩放比尺分别为 λ_L , λ_T , λ_M , 则对原始颗粒系统中的任一物理量 q 及其精确缩尺系统中相对应的物理量 \bar{q} , 定义该物理量的缩放比尺为 λ_q , 即

$$\bar{q} = \lambda_q q \quad (7)$$

将该物理量的量纲依照式 (6) 所示的形式进行展开, 3 个基本物理量量纲的指数表示为 α , β , γ , 则该物理量的缩放比尺与 3 个基本物理量的缩放比尺间应满足关系式为^[25]

$$\lambda_q = \lambda_L^{\alpha} \cdot \lambda_T^{\beta} \cdot \lambda_M^{\gamma} \quad (8)$$

在精确缩尺中, 通常采用密度比尺为 1 来替代质量比尺^[21, 24-25], 考虑到密度量纲可由长度量纲 $[L]$ 和质量量纲 $[M]$ 进行表示, 经过换算, 可得到长度、时间、质量 3 个基本物理量的缩放比尺分别为

$$\lambda_L = h, \quad \lambda_T = h, \quad \lambda_M = h^3 \quad (9)$$

式中: h 为精确缩尺系统对原始颗粒系统的缩放比例。

为了确保精确缩尺系统和原始颗粒系统的可比性, 需要建立各主要物理量之间的精确缩尺准则。采用前文述及的推导方式, 可通过物理关系将目标物理量量纲表达为长度、时间、质量 3 个物理量量纲的幂

积形式,例如,对于罚刚度 p_c ,可通过接触刚度 $[k_c]$ 、接触面积量纲 $[A]$ 逐步得到式(6)所示的格式:

$$\begin{aligned} [p_c] &= [k_c][A]^{-1} = [F][\delta_c]^{-1}[A]^{-1} \\ &= [M][a][\delta_c]^{-1}[A]^{-1} = [L]^{-2}[T]^{-2}[M] \quad . \quad (10) \end{aligned}$$

进而由式(8), (9), 计算得到力的缩放比尺为

$$\lambda_{p_c} = \lambda_L^{-2} \cdot \lambda_T^{-2} \cdot \lambda_M = h^{-2} \cdot h^{-2} \cdot h^3 = h^{-1} \quad . \quad (11)$$

边界荷载、材料本构参数和接触模型参数中主要物理量的缩放比尺如表1所示。

表1 主要物理量的精确缩尺准则

Table 1 Exact scaling criteria for major physical quantities

物理量	符号	量纲	缩放比尺
长度	L	$[L]$	h
时间	T	$[T]$	h
质量	m	$[M]$	h^3
力	F	$[L][T]^{-2}[M]$	h^2
应力	σ	$[L]^{-1}[T]^{-2}[M]$	1
应变	ε	[1]	1
弹性模量	E	$[L]^{-1}[T]^{-2}[M]$	1
泊松比	ν	[1]	1
罚刚度	p_c	$[L]^{-2}[T]^{-2}[M]$	h^{-1}
摩擦系数	μ	[1]	1
阻尼系数	β_c	[1]	1

2 数值试验验证

2.1 试验流程

为进一步论证基于精确缩尺和粗粒化的 FDEM 方法在颗粒材料数值模拟中的适用性,本文通过颗粒材料三轴剪切数值试验进行效果验证。如图3所示,三轴剪切数值试验主要包含数值试样制备和固结剪切2个步骤。

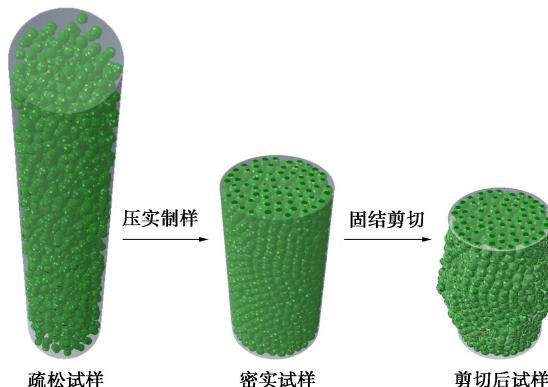


图3 三轴剪切数值试验主要步骤

Fig. 3 Procedures of numerical triaxial shear tests

首先进行数值试样制备,参照室内三轴剪切试验的试样尺寸,制备尺寸为 $\phi 300 \text{ mm} \times 600 \text{ mm}$ 的圆柱形试样。如图3所示,本文采用动力法进行制样^[26],即先在一个较高但与试验试样等径的刚性圆柱容器中

生成指定总体积与粒径分布的随机颗粒得到疏松颗粒集合体试样,然后通过施加位移边界控制容器上下底面加载板将松散的颗粒集合体试样压缩为指定高度的密实集合体试样。

完成数值试样制备后,即可进行三轴剪切数值试验。如图4所示,将圆柱容器侧面设置为允许发生大变形的柔性膜单元,上下底板设置为不能变形的刚体单元,下加载板施加完全约束,上加载板则通过位移边界控制加载。剪切试验分为2个荷载步:①用来模拟围压固结过程,即在上加载和侧膜上施加指定围压使试样固结;②模拟剪切过程,保持侧膜上的围压为不变,并给上加载板施加竖直向下的位移增量使试样发生变形,剪切过程中持续监测加载板的轴向力大小。

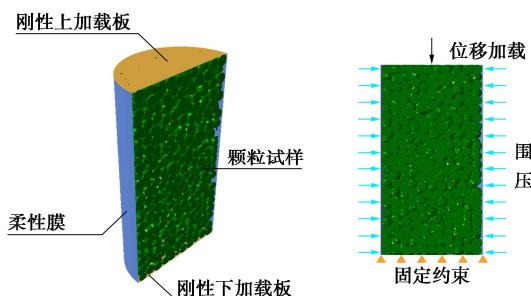


图4 三轴剪切数值试验加载示意图

Fig. 4 Diagram of triaxial shear loading numerical tests

2.2 试验设计

为了降低试验的复杂性,不考虑颗粒形状、颗粒破碎等因素,采用较简单的等径颗粒系统和二元颗粒系统进行数值试验,2类颗粒系统的固相体积分数为65%。在等径颗粒系统中,设定原始颗粒系统中颗粒粒径为15 mm,将其分别按照 $h=2.0$, $h=3.0$, $h=4.0$ 等3种缩放比尺建立粗粒化模型,得到颗粒粒径分别为30, 45, 60 mm的数值试样。在二元颗粒系统中,采用2种不同粒径的颗粒生成数值试样,2种粒径的颗粒质量比为1:1,原始颗粒系统中颗粒粒径分别为15, 30 mm,分别将其按照 $h=1.5$ 和 $h=2.0$ 的缩放比尺建立粗粒化模型,得到颗粒粒径为22.5~45, 30~60 mm的二元颗粒系统数值试样。统计所制备颗粒试样的信息如表2所示。

表2 数值试样信息

Table 2 Information of numerical samples

类别	粒径/mm	颗粒数量	单元数	节点数
等径 颗粒 系统	15	15186	1214880	3113130
	30	1898	151840	389090
	45	562	44960	115210
	60	237	18960	48585
二元 颗粒 系统	15~30	8543	683440	1751315
	22.5~45	2532	202560	519060
	30~60	1072	85760	219760

本文数值试验的目的在于研究精确缩尺准则和粗粒化方法对原始颗粒系统的力学响应以及计算效率的影响。为了对比是否引入精确缩尺准则引起的力学响应差异性, 将粗粒化试样设置为引入精确缩尺准则的试验组和不引入精确缩尺准则的对照组, 原始颗粒系统的参数设定如表 3 所示。各组数值试验的设置情况如表 4 所示。

表 3 原始颗粒系统材料和接触参数

Table 3 Contact parameters of original particle system materials

参数名称	参数值	单位
弹性模量	40	GPa
泊松比	0.2	—
罚刚度	1.8×10^{11}	N/m ³
罚刚度比	1	—
摩擦系数	0.3	—
阻尼系数	0.2	—
阻尼系数比	1	—

表 4 各组数值试验设置

Table 4 Settings for each numerical test

类别	编号	粒径/mm	缩放比 尺 h	是否引入精确缩 尺准则
等径颗粒 系统	E1	15	1.0	—
	E2	30	2.0	×
	E3	45	3.0	×
	E4	60	4.0	×
	E2s	30	2.0	✓
	E3s	45	3.0	✓
	E4s	60	4.0	✓
二元颗粒 系统	B1	15~30	1.0	—
	B2	22.5~45	1.5	×
	B3	30~60	2.0	×
	B2s	22.5~45	1.5	✓
	B3s	30~60	2.0	✓

2.3 宏观应力变形响应

参照传统物理试验的处理方法, 通过提取不同时刻试样高度 H , 试样体积 V 和上加载板上的轴向力 F_l , 分别计算各个时刻相应的轴向应变 ε_l 、体积应变 ε_v 和轴向应力 σ_l 。考虑到试样加载过程中发生了大变形, 采用对数格式计算应变值, 采用平均截面积计算轴向应力值^[26], 即分别按照下式计算剪切过程中试样在不同时刻时的轴向应变 ε_l 、体积应变 ε_v 和轴向应力 σ_l :

$$\varepsilon_l = \int_{H_0}^H \frac{-dH'}{H'} = -\ln\left(\frac{H}{H_0}\right) \quad , \quad (12)$$

$$\varepsilon_v = \int_{V_0}^V \frac{-dV'}{V'} = -\ln\left(\frac{V}{V_0}\right) \quad , \quad (13)$$

$$\sigma_l = \frac{F_l}{A^*} = \frac{F_l}{V/H} \quad . \quad (14)$$

式中: H_0 , V_0 分别为初始时刻的试样高度和体积; H , V 分别为计算时刻的试样高度和体积; F_l 为计算时刻

的轴向力值; A^* 为计算时刻试样的平均截面积, 由试样体积和高度给出。

根据三轴应力状态特点, 按下式计算应力比 η :

$$\eta = \frac{q}{p} = \frac{\sigma_l - \sigma_0}{(\sigma_l + 2\sigma_0)/3} = \frac{3(\sigma_l - \sigma_0)}{\sigma_l + 2\sigma_0} \quad . \quad (15)$$

采用上述方法计算各组数值试验在不同加载时刻的应力与应变, 绘制等径颗粒系统的应力比曲线和体积应变曲线分别如图 5, 6 所示, 绘制二元颗粒系统的应力比曲线和体积应变曲线分别如图 7, 8 所示。

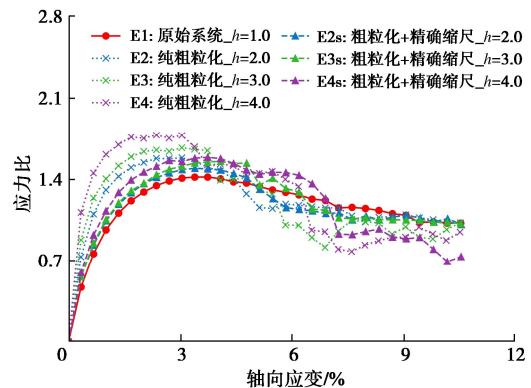


图 5 等径颗粒试验应力比曲线

Fig. 5 Curves of stress ratio of equal diameter particle tests

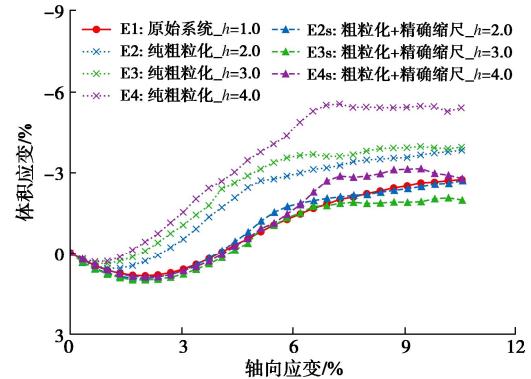


图 6 等径颗粒试验体积应变曲线

Fig. 6 Curves of volume strain of equal diameter particle tests

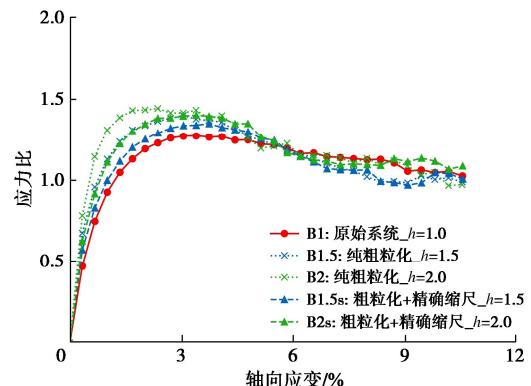


图 7 二元颗粒试验应力比曲线

Fig. 7 Curves of stress ratio of binary particle tests

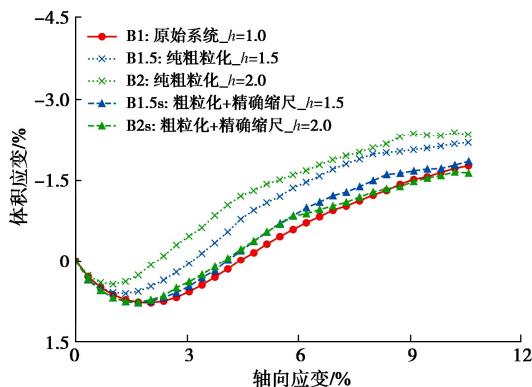


图 8 二元颗粒试验体积应变曲线

Fig. 8 Curves of volume strain of binary particle tests

从图 5~8 中可以看出,无论是等径颗粒体系还是二元颗粒体系,在不引入精确缩尺准则的情况下,粗粒化系统和原始颗粒系统的宏观力学响应均存在较大的偏差,且这种偏差随着粗粒化缩放比尺的增大逐渐变大。具体表现为:随着粗粒化缩放比尺的增加,峰值应力比及应力比曲线初始切线模量均逐渐提高,峰值状态逐渐前移,但最终状态的残余应力比基本不改变,尤其是当缩放比尺达到 4 时,峰值应力比到残余应力比发生显著的降低,引起数值模拟结果失真;试样的剪缩能力减弱,剪胀能力显著增强,剪胀点前移。当引入精确缩尺准则后,粗粒化引起的宏观力学响应偏差均得到了效果显著的修正,相比于未引入精确缩尺准则的对照组,试验结果更接近于未进行粗粒化的原始颗粒系统。

因此,对等径颗粒系统和二元颗粒系统,纯粹的粗粒化系统与原始颗粒系统在力学特性上差异性明显,当缩放比尺较大时,甚至会引起数值模拟结果的失真,因此必须进行模型参数的修正以逼近原始颗粒系统的力学特性,而引入精确缩尺准则能够减弱粗粒化带来的力学特性差异,但当缩放比尺较大时,力学特性上仍存在一定差异。

2.4 细观接触力

为了从细观力学特性的角度进一步探讨引入精确缩尺准则的粗粒化方法的效果,揭示前述宏观力学响应的内在细观机理,本节通过提取颗粒间接触力对各试样进行细观分析。与 DEM 方法不同,由于 FDEM 方法中进行了颗粒的有限元网格剖分,颗粒的接触力信息被保存在颗粒的有限元节点上,1 个颗粒的某一接触可能同时包含 1 个或多个有限元节点。因此,进行粒间接触力统计分析前需先对颗粒节点接触力进行聚类。本文采用密度聚类算法进行接触聚类^[14],具体算法如下:

(1) 对任意颗粒,统计颗粒表面法向接触力不为

0 的节点,建立各颗粒的样本点集。

(2) 遍历样本点集中的节点,使任一节点及其邻域内其他法向接触力不为 0 节点合并为簇。

(3) 邻域内无其他节点的节点为噪声点,由于较小接触处可能存在仅含 1 个节点的接触,因而噪声点单独成簇。

对各颗粒进行接触力聚类,并检索其邻域内的其他颗粒,在接触力相近的颗粒间建立接触力对。通过设置合适的接触力聚类阈值和接触对匹配阈值,提取各组数值试验在峰值应力比处的接触力。由于法向接触力对颗粒材料的传力影响更为显著^[27],本文主要考察法向接触力的统计规律。经整理,各组数值试验的平均接触力水平如表 5 所示。

表 5 峰值处平均法向接触力

Table 5 Mean normal contact forces at peak

类别	编号	峰值平均法向接触力/N	对原系统比值
等径颗粒系统	E1	80.30	1.00
	E2	1172.19	4.18
	E3	2703.42	9.64
	E4	3831.52	13.67
	E2s	1046.27	3.73
	E3s	2070.92	7.39
	E4s	3109.17	11.09
二元颗粒系统	B1	306.42	1.00
	B2	788.65	2.57
	B3	1323.10	4.32
	B2s	658.55	2.15
	B3s	1122.34	3.66

从表 5 可以看出,在等径颗粒系统和二元颗粒系统内,无论是否引入精确缩尺准则,粗粒化后颗粒间平均法向接触力的大小均随着粗粒化缩放比例的增大而增大。这是因为在外界的边界条件不变的情况下,随着缩放比尺的增加,边界处的接触数量逐渐减少,使得边界接触力水平有所提升,进而通过粒间接触力链传递提高粒间接触力水平。依据前文对精确缩尺理论的分析,将颗粒系统放大到 h 倍后,粒间接触力应放大到原系统的 h^2 倍。从表 5 的统计结果来看,粗粒化系统中粒间接触力同样近似符合精确缩尺系统下的这一缩放规律,这也佐证了粗粒化系统可以视为精确缩尺系统的局部的观点。

将各组数值试验的法向接触力归一化,绘制等径颗粒系统和二元颗粒系统法向接触力分布图分别如图 9、10 所示。从图 9、10 可以看出,不同缩放比尺下的粗粒化系统与引入精确缩尺准则的粗粒化系统中法向接触力的分布总体上比较一致,随着粗粒化缩放比尺的增加,超强 ($F_n/\bar{F}_n > 4$) 和极弱 ($F_n/\bar{F}_n < 0.2$) 接触力的比例稍有增大,接触力大小分布不均匀性稍微增强。

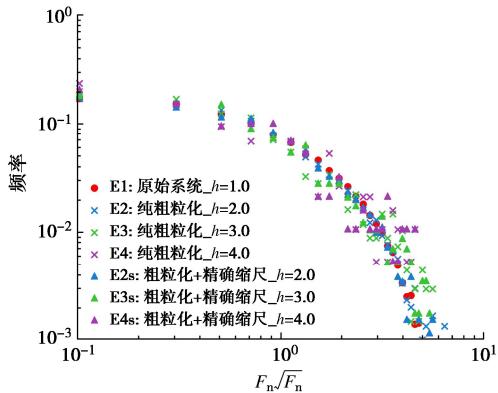


图 9 等径颗粒试验法向接触力分布

Fig. 9 Distribution of normal contact force of equal diameter particle tests

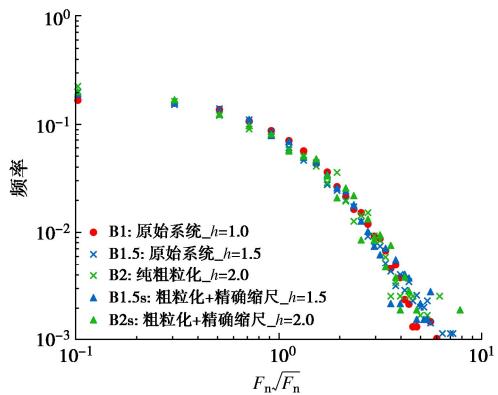


图 10 二元颗粒试验法向接触力分布

Fig. 10 Distribution of normal contact force of binary particle tests

结合前文的理论分析, 在理想情况下, 对于缩放比尺为 h 的粗粒化系统, 在相同的外荷载作用下, 粒间接触力的分布特征无明显改变, 粒间接触力水平近似提升到原始颗粒系统的 h^2 倍。若不引入精确缩尺准则, 根据式(1)中的接触力计算方法, 颗粒间嵌入量与原系统近似相同, 但由于接触数量的降低, 因颗粒嵌入产生的体积重叠量会减小, 因而宏观上表现出比原始颗粒系统更弱的剪缩和更强的剪胀; 引入精确缩尺准则后, 根据式(1)中的可知粗粒化系统的粒间嵌入量近似增大到原始颗粒系统的 h 倍, 产生与原始颗粒系统相近的体积重叠, 宏观上表现出与原始颗粒系统相似的体积响应。

2.5 计算效率

统计各组数值试验的计算时间, 结合计算使用的并行计算核数, 绘制不同缩放比尺粗粒化的计算核时曲线如图 11 所示, 由于粗粒化方法大幅降低了数值试验的计算规模, 因此大幅降低数值计算所需核时, 提升计算效率。同时, 随着粗粒化缩放比尺的逐渐增大, 颗粒规模的减小程度逐渐降低, 计算核时的降幅逐渐减小, 缩放比尺增加带来的效率收益有所下降。

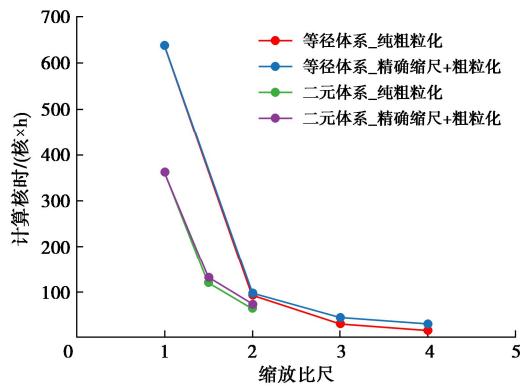


图 11 各数值试验计算时长

Fig. 11 Calculation time of each numerical test

综合前述对力学特性和计算效率的分析可知, 随着粗粒化缩放比尺的增大, 引入精确缩尺的粗粒化系统相对原始颗粒系统的计算偏差会逐渐提升, 且计算效率增幅变缓。因此, 本方法更适用于较低的缩放比尺, 达到牺牲少量精度换取较高计算效率的目的。

3 适用性和局限性讨论

根据前文的论述, 本文提出的精确缩尺和粗粒化 FDEM 方法中, 要使得粗粒化系统能够尽可能还原原始颗粒系统的力学特性, 需要满足 2 个重要的条件: ①存在一个能包含粗粒化系统的精确缩尺系统; ②原始颗粒系统应尽可能均质。

对于第一个条件, 相对较容易满足, 只要按照特定的比尺对颗粒系统进行全局粗粒化操作, 理论上会存在一个相同比尺的精确缩尺系统, 并且该粗粒化系统能够近似视为该精确缩尺系统的一部分。然而, 对于局部粗粒化问题, 即对原始颗粒系统中的一部分特定颗粒进行粗粒化操作, 而另一部分颗粒保持不变, 如谢亦朋等^[23]研究的土石混合体问题, 由于这种粗粒化方式仅对局部细颗粒进行, 会改变原始颗粒系统的级配特征, 无法找到一个包含该粗粒化系统的精确缩尺系统, 因而难以通过引入精确缩尺法则来得到能够还原原始颗粒系统的粗粒化参数。

对于第②个条件, 与之相关联的因素包括颗粒形状、颗粒在系统中的分布状况、颗粒自身的物理性质等, 情况较复杂。在实际问题中, 颗粒系统通常会表现出各向异性, 局部性质很难完全等效全局性质。对于存在明显颗粒分层, 如表层岩石颗粒发生风化、湿化等引起的非均质情况, 即便存在一个包含粗粒化系统的精确缩尺系统, 由于其局部和全局性质的差异性, 引入精确缩尺法则的粗粒化系统对原始颗粒系统力学特性的还原也会十分有限。

综上所述, 本文所提方法主要针对的是颗粒分布

比较均匀的颗粒体系的全局粗粒化问题。对于局部粗粒化和非均匀分布的颗粒体系具体的量化分析，还有待更加深入的研究。

4 结 论

以颗粒材料作为研究对象，在FDEM方法中引入了精确缩尺和粗粒化方法，通过理论推导和数值试验论证，得到4点主要结论。

(1) 精确缩尺和粗粒化的方法不仅适用于基于DEM方法的颗粒计算，同样能应用于基于FDEM方法的颗粒计算。主要区别在于在FDEM方法中采用的是基于罚函数的接触模型，故需建立接触模型中罚刚度等参数的精确缩尺准则。

(2) 宏观应力变形结果表明，粗粒化在提升计算效率的同时会引起颗粒系统的宏观力学响应发生明显的改变，且变化程度随着粗粒化缩尺比例增大而不断增大，尤其是当缩放比尺较大时，会引起数值模拟结果失真，因而在颗粒系统中采用粗粒化方法进行计算时，必须要对模型参数进行必要修正以逼近原始颗粒系统的宏观力学特性。引入精确缩尺准则后，粗粒化系统与原始颗粒系统的偏差得到补正，能够近似还原原始颗粒系统的宏观力学响应。

(3) 细观接触力分析结果表明，粗粒化系统与原始颗粒系统具有相似的接触力分布特征，且接触力水平近似服从精确缩尺理论的缩尺关系，与引入精确准则无关。在引入精确缩尺准则的情况下，相近的接触力水平下将引起更大的颗粒嵌入，增强粗粒化系统的剪缩性，减弱粗粒化系统的剪胀性，使粗粒化系统更符合原始颗粒系统的宏观力学特性。

(4) 引入精确缩尺和粗粒化方法后，使用FDEM方法进行颗粒材料数值模拟的效率明显提升，本文提出的方法能够为颗粒材料的FDEM数值模拟方法提供一种加速方式。但试验结果也表明，在较大的缩放比尺下，粗粒化系统的宏观力学特性与原始颗粒系统相差较大，且计算效率的提升幅度较小，因而本文所提方法仅宜采用较低缩放比尺。

参 考 文 献：

- [1] 吴 杨, 容浩俊, 王金莲, 等. 颗粒形状和中主应力对砂土力学特性耦合影响的真三轴试验研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2023, 42(2): 497-507. (WU Yang, RONG Haojun, WANG Jinlian, et al. A true triaxial experimental study on the coupled effect of particle shape and intermediate principal stress on the mechanical properties of sand[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2023, 42(2):

- 497-507. (in Chinese))
- [2] 康 馨, 陈植欣, 雷 航, 等. 基于3D打印研究颗粒形状对砂土宏观力学性质的影响[J]. 岩土工程学报, 2020, 42(9): 1765-1772. (KANG Xin, CHEN Zhixin, LEI Hang, et al. Effects of particle shape on mechanical performance of sand with 3D printed soil analog[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2020, 42(9): 1765-1772. (in Chinese))
- [3] GUO Y, CURTIS J S. Discrete element method simulations for complex granular flows[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2015, 47: 21-46..
- [4] HUANG X, O'SULLIVAN C, HANLEY K J, et al. Discrete-element method analysis of the state parameter[J]. Géotechnique, 2014, 64(12): 954-965.
- [5] LU M, McDOWELL G R. The importance of modelling ballast particle shape in the discrete element method[J]. Granular Matter, 2007, 9(1): 69-80.
- [6] COETZEE C J. Calibration of the discrete element method and the effect of particle shape[J]. Powder Technology, 2016, 297: 50-70.
- [7] 徐 琛, 周 伟, 马 刚, 等. 基于离散元法的颗粒破碎模拟研究进展[J]. 岩土工程学报, 2018, 40(5): 880-889. (XU Kun, ZHOU Wei, MA Gang, et al. Review of particle breakage simulation based on DEM[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2018, 40(5): 880-889. (in Chinese))
- [8] McDOWELL G R, HARIRECHE O. Discrete element modelling of soil particle fracture[J]. Géotechnique, 2002, 52(2): 131-135.
- [9] DE BONO J, McDOWELL G. Particle breakage criteria in discrete-element modelling[J]. Géotechnique, 2016, 66(12): 1014-1027.
- [10] ZHOU W, WANG D, MA G, et al. Discrete element modeling of particle breakage considering different fragment replacement modes[J]. Powder Technology, 2020, 360: 312-323.
- [11] 肖宇轩, 马 刚, 陆 希, 等. 堆石颗粒在复杂约束模式的破碎特性[J]. 浙江大学学报(工学版), 2022, 56(8): 1514-1522, 1559. (XIAO Yuxuan, MA Gang, LU Xi, et al. Breakage behaviour of rockfill particles in complicated constraint patterns[J]. Journal of Zhejiang University (Engineering Science), 2022, 56(8): 1514-1522, 1559. (in Chinese))
- [12] 周 剑, 马 刚, 周 伟, 等. 基于FDEM的岩石颗粒破碎后碎片形状的统计分析[J]. 浙江大学学报(工学版),

- 2021, **55**(2): 348-357. (ZHOU Jian, MA Gang, ZHOU Wei, et al. Statistical analysis of fragment shape of rock grain after crushing based on FDEM[J]. Journal of Zhejiang University (Engineering Science), 2021, **55**(2): 348-357. (in Chinese))
- [13] 邹宇雄, 马 刚, 李易奥, 等. 抗转动对颗粒材料组构特性的影响研究[J]. 岩土力学, 2020, **41**(8): 2829-2838. (ZOU Yuxiong, MA Gang, LI Yiao, et al. Impact of rotation resistance on fabric of granular materials[J]. Rock and Soil Mechanics, 2020, **41**(8): 2829-2838. (in Chinese))
- [14] 邹宇雄, 周 伟, 陈 远, 等. 颗粒形状对岩土颗粒材料传力特性的影响机制[J]. 水力发电学报, 2020, **39**(5): 17-26. (ZOU Yuxiong, ZHOU Wei, CHEN Yuan, et al. Mechanism of particle shape affecting force transfer properties of granular geo-materials[J]. Journal of Hydroelectric Engineering, 2020, **39**(5): 17-26. (in Chinese))
- [15] MA G, ZHOU W, CHANG X L. Modeling the particle breakage of rockfill materials with the cohesive crack model[J]. Computers and Geotechnics, 2014, **61**: 132-143.
- [16] MA G, ZHOU W, CHANG X, et al. Formation of shear bands in crushable and irregularly shaped granular materials and the associated microstructural evolution[J]. Powder Technology, 2016, **301**: 118-130.
- [17] MA G, ZHOU W, REGUEIRO R A, et al. Modeling the fragmentation of rock grains using computed tomography and combined FDEM[J]. Powder Technology, 2017, **308**: 388-397.
- [18] LIU Q S, WANG W Q, MA H. Parallelized combined finite-discrete element (FDEM) procedure using multi-GPU with CUDA[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2020, **44**(2): 208-238.
- [19] LISJAK A, MAHABADI O K, HE L, et al. Acceleration of a 2D/3D finite-discrete element code for geomechanical simulations using General Purpose GPU computing[J]. Computers and Geotechnics, 2018, **100**: 84-96.
- [20] 程宏旸, WEINHART T. 关于采用粗粒化提高颗粒材料多尺度模拟守恒特性的研究[J]. 计算力学学报, 2022, **39**(3): 373-380. (CHENG Hongyang, WEINHART T. On the conservation properties of CG-enriched concurrent coupling methods for multi-scale modeling of granular materials[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2022, **39**(3): 373-380. (in Chinese))
- [21] 赵婷婷, 冯云田. 大规模颗粒系统的精确缩尺和粗粒化离散元方法[J]. 计算力学学报, 2022, **39**(3): 365-372. (ZHAO Tingting, FENG Yuntian. Exact scaling laws and coarse-grained discrete element modelling of large scale granular systems[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2022, **39**(3): 365-372. (in Chinese))
- [22] 季顺迎. 颗粒材料计算力学专辑序[J]. 计算力学学报, 2022, **39**(3): 263-264. (JI Shunying. Preface to computational mechanics of granular materials[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2022, **39**(3): 263-264. (in Chinese))
- [23] 谢亦朋, 张 聪, 阳军生, 等. 基于局部粗粒化离散元的冰水堆积体隧道围岩破坏特征与加固措施研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2021, **40**(3): 576-589. (XIE Yipeng, ZHANG Cong, YANG Junsheng, et al. Study on failure characteristics and reinforcement measures of surrounding rock of glacial deposit tunnels based on coarse-grained DEM[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2021, **40**(3): 576-589. (in Chinese))
- [24] 易 颖, 周 伟, 马 刚, 等. 基于精确缩尺的颗粒材料流变研究[J]. 岩土力学, 2016, **37**(6): 1799-1808. (YI Ying, ZHOU Wei, MA Gang, et al. Study of rheological behaviors of granular materials based on exact scaling laws[J]. Rock and Soil Mechanics, 2016, **37**(6): 1799-1808. (in Chinese))
- [25] FENG Y T, OWEN D R J. Discrete element modelling of large scale particle systems—I: exact scaling laws[J]. Computational Particle Mechanics, 2014, **1**(2): 159-168.
- [26] MA G, ZHOU W, CHANG X L, et al. Combined FEM/DEM modeling of triaxial compression tests for rockfills with polyhedral particles[J]. International Journal of Geomechanics, 2014, **14**(4): 04014014.
- [27] AZÉMA E, RADJAI F, SAUSSINE G. Quasistatic rheology, force transmission and fabric properties of a packing of irregular polyhedral particles[J]. Mechanics of Materials, 2009, **41**(6): 729-741.