论文

多尺度复杂系统物理建模与模拟专辑

颗粒介质物质点法与离散元法的多尺度建模

刘传奇, 孙其诚*, 金峰

清华大学水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084

* 联系人, E-mail: qcsun@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2016-09-19; 接受日期: 2016-09-29; 网络出版日期: 2017-03-24

国家自然科学基金资助项目 (编号: 11272048, 51239006, 11572178)

摘要 颗粒介质是由大量离散颗粒构成的无序材料, 在工业生产与自然界中广泛存在. 在外界作用下, 颗粒材料可以类似固体保持稳定, 也可类似流体发生流动, 且类固体和类流体之间可以自然转化, 目前人们难以采用统一的连续本构进行描述. 本文提出了物质点法 (Material Point Method, MPM) 与离散元法 (Discrete Element Method, DEM) 的多尺度建模框架, 亦即宏观尺度采用适用于大变形问题的 MPM, 颗粒尺度则采用 DEM 描述每个颗粒运动, 每个物质点的力学性质由该点处若干颗粒构成的代表性体积元的力学性质计算得到, 宏观尺度 MPM 所得变形梯度作为边界条件施加到体积元中, 基于 DEM 计算得到域内的平均柯西应力, 反馈到 MPM 计算, 以此实现跨尺度研究. 以沙堆倒塌作为算例, 验证了 MPM/DEM 多尺度建模在描述颗粒复杂力学行为的有效性, 并对倒塌过程中, 宏观应变等信息与内在接触力链网络的关联进行了讨论. MPM/DEM 多尺度建模没有引入唯象本构, 且适用于大变形问题, 为颗粒介质的多力学状态研究提供了新的思路.

关键词 颗粒介质, 多尺度建模, 离散元法, 物质点法, 沙堆倒塌

PACS: 45.70.-n, 02.60.-x, 45.70.Ht

1 引言

颗粒介质 (Granular Materials) 由大量颗粒组成, 是多体相互作用的无序体系^[1-3], 这决定了颗粒体系独特的结合结构和力学性质. 颗粒物质广泛存在于工程建设、工业生产和自然界中, 当研究问题的尺度远大于颗粒粒径时, 颗粒体系通常处理成等效连续介质^[4]. 长期以来, 基于经验和实验数据, 人们已经建立一批有实际应用价值的颗粒介质宏观本构

(亦即, 应力 - 应变 (率) 之间的关系), 能够反映颗粒体系在某些特定边界条件下的力学响应特性.

与经典弹塑性材料相比, 颗粒介质具有明显的结构不均匀性 (Structural Heterogeneity), 导致动力学不均匀性 (Dynamical Heterogeneity), 如变形局部化 (Strain Localization)、非局域流变 (Non-Local Rheology) 等现象, 不恰当的平均化处理 (Coarse Graining) 往往掩盖了这些不均匀性, 很难解释实际颗粒物质表现出的复杂宏观性质, 比如人们所争论的: 是采用

引用格式: 刘传奇, 孙其诚, 金峰. 颗粒介质的物质点法与离散元法的多尺度建模. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070015

Liu C Q, Sun Q C, Jin F. Multi-scale modelling for granular materials using material point method and discrete element method (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070015, doi: 10.1360/SSPMA2016-00394

一个还是多个屈服面? 是否采纳 Drucker 公设? 用关联还是不关联的流动法则? 固态 - 流态转变机理是什么? 等. 在缺乏对颗粒介质内部物理过程、变形机制、失稳机理和能量耗散等较为清晰认识的情况下, 基于等效连续介质假设, 不断引入额外参数建立本构关系模型的做法将面临很大难度, 模型将变得越来越复杂, 并且参数的物理含义并不明确^[5].

根据牛顿第二运动定律, 更新颗粒介质中每个颗粒的速度和位置, 进而确定性地演化颗粒介质, 刻画宏观力学响应特性, 这种数值方法就是颗粒离散元方法^[3], 对认识颗粒材料结构、内部物理过程和洞察新现象等方面发挥了强大作用, 为揭示颗粒材料复杂宏观力学的物理机理奠定了基础. 但是, 颗粒离散元法计算强度大, 人们可以承受的计算耗时限制了该方法在工程问题中的应用. 比如, 常见的几十万方的碎屑流灾害含有几十亿计的颗粒, 即使采用离散元法的 GPU 并行化, 也需要较大的机时耗费, 此时离散元法进行数值模拟的经济性便不再明显.

多尺度建模是指将宏观计算与离散元法计算有效关联的建模思路, 大致分为三类建模方法: (1) 从若干颗粒构成的代表性体积元 (Representative Volume Element, RVE) 中提取连续本构中所需的模型参数, 如塑性应变等, 宏观所得应变信息作为边界条件施加到代表元中^[6], 此时仍需对唯象本构的适用性进行考量; (2) 对重点研究区采用离散模型, 而远端采用连续介质模型, 如 Cosserat 体, 进行跨尺度建模, 这时, 问题的难点在于模型交界面处的信息交换^[4,7]; (3) 完全摒弃显式本构模型, 基于离散元法, 从体积元中获取应力 - 应变关系, 输入到连续介质数值计算方法中, 实现大规模计算. 这种黑箱建模思路是对颗粒介质建模研究的极大推进. 其中, 以有限元法 (Finite Element Method, FEM) 与离散元法的层级建模 (Hierarchical Modelling) 为典型方法^[8,9]. 此时, FEM 中高斯积分点由离散颗粒集代表, 颗粒集的输入量为由 FEM 得到的位移边界, 而输出量为颗粒作用力在域内平均得到的柯西应力, 以及单元切向刚度, 形成整体刚度矩阵, 进行 FEM 计算. 概括而言, DEM 研究颗粒尺度, FEM 研究宏观尺度, FEM/DEM 方法没有引入连续本构模型, 且两者优势得到了有效结合.

在大变形条件下, 有限元方法发生网格畸变, 造

成计算失真, 甚至崩溃. 考虑到颗粒介质的力学状态变化剧烈, 比如在碎屑流灾害中观察到的固态 - 流态力学行为的自然转化, 因而将多尺度建模思路扩展应用到大变形条件势在必行. 任意的拉格朗日欧拉单元 (Arbitrary Lagrangian-Eulerian Element, ALE), 网格相对于物体与空间独立运动, 介于拉格朗日描述与欧拉描述之间, 能有效避免网格畸变, 而被广泛应用到大变形问题中^[10]. 但该方法研究域的边界不能在变形过程中发生改变, 比如原始连续体变成多个散体的情况, 因而也难以被应用到颗粒材料描述中. 颗粒有限元 (Particle Finite Element Method, PFEM) 仍采用有限元思路, 记录网格节点的信息, 网格不断重构, 可被应用到颗粒介质大变形条件^[11], 但复杂的网格构成拓扑关系, 增加了计算耗时. 对颗粒介质进行多尺度建模, 宏观数值方法采用无网格方法看似更为合适. 较为流行的无网格方法主要有光滑粒子法 (Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH) 与物质点法, 其中光滑粒子法粒子之间通过核函数进行关联, 在模拟流体流动、冲击等问题上很有优势, 难点在于需虚设粒子来处理空间边界^[12,13].

物质点法将研究域进行子域剖分, 采用携带了所有物理信息的质量点代表子域, 在计算中, 追踪各物质点空间位置, 更新应力、应变等信息, 即采用了拉格朗日描述思路, 而物质点与物质点的关联是通过固定的背景网格建立, 选取恰当的权函数, 可实现物质点到背景网格节点的映射, 控制方程建立在集中了所有物质点信息的背景网格节点上, 亦是“场”变量的更新思路, 而这过程, 由于背景网格每个计算步都采用规则未变形的网格, 沿用了欧拉描述的思路. 在物质点法中, 避免了物体的网格离散, 而边界条件施加在固定背景网格节点上, 且应力 - 应变关系是应用在代表一定影响域的物质点上, 这是有限元的思路. 因而, 物质点法是一种无网格的有限元法, 但摒弃了构建复杂位移函数, 仅通过合适的权函数及其导数, 将各物质点通过背景网格进行关联. 因此, 物质点法适合颗粒介质复杂力学行为的描述.

本文借鉴 FEM/DEM 多尺度建模的思路^[8], 建立可适用于大变形条件下的颗粒介质多尺度建模框架, 宏观描述采用物质点法, 应力 - 应变关系在离散元法模拟的体积元中提取, 讨论了在大变形条件下

适合颗粒介质的应变度量, 评价了 MPM/DEM 多尺度模拟的优缺点.

2 MPM/DEM 多尺度建模框架

多尺度建模的思路如图 1(a) 所示, 宏观采用物质点法进行计算, 每个物质点对应一个颗粒代表性体积元, 宏观物质点处的变形梯度通过边界条件施加到与之对应的颗粒代表性体积元中, 进行 DEM 计算, 返回体积元内平均的接触应力, 再进行 MPM 的下一步计算.

颗粒尺寸在 mm 量级, 常规计算机进行离散元模拟的计算规模为几万颗粒, 其构成的试样尺寸大约在 dm 量级, 而实际工程尺寸的连续体在 km 量级, 进行空间剖分后的子连续体的空间尺寸也在 m 量级, 因而在 MPM/DEM 建模过程中, 需要讨论尺寸匹配问

题. 如图 1(b) 所示, 按照代表性体积元的含义, 当颗粒集合的尺寸达到一定量级后试样的本构关系将保持不变, 因而, 由若干 mm 量级的颗粒构成 dm 量级的代表性体积元与 m 量级的物质点满足相同的应力应变关系, 进而, 宏观计算得到的物质点上的变形梯度以边界条件施加到代表性体积元上, 通过 DEM 进行计算后返回的接触应力, 是可以直接施加到宏观物质点上的.

2.1 物质点法算法

如图 2(a) 所示, 物质点法作为一种无网格方法, 初始连续体被离散为若干个子连续体, 每个子连续体被一个物质点代表, 而非有限元中的网格. 如图 2(b) 所示, 物质点通过权函数与背景网格进行关联, 将质量、动量、受力等信息映射到背景网格节点上, 背景网格节点受到不平衡力作用而更新空间位置与动量, 更新后的背景网格节点信息反馈至物质点处, 在新的时步中, 采用规则背景网格. 在整个计算过程中, 携带所有物理信息的物质点被时刻追踪, 是拉格朗日描述的思想, 而在每步计算开始时, 都采用规则的背景网格, 又是欧拉描述的思想. 因此, 物质点法则将两种描述进行统一.

在物质点法中, 物质点存储所有物理量, 质量守恒是自然满足的, 其控制方程主要是动量守恒

$$\rho \dot{v}_i = \sigma_{ij,j} + \rho b_i, \quad (1)$$

式中, ρ 为密度, $\dot{v}_i$ 为加速度, $\sigma_{ij,j}$ 为应力梯度, b_i 为体

图 1 (网络版彩图) MPM/DEM 多尺度建模框架与特征尺寸. (a) 颗粒介质的 MPM/DEM 多尺度建模; (b) 物质点尺寸与代表性体积元尺寸

Figure 1 (Color online) Schematic of multi-scale modelling using MPM/DEM and the characteristic sizes. (a) Solution procedure of the hierarchical multi-scale approach; (b) characteristic sizes of a RVE for DEM simulation and a material point.

图 2 (网络版彩图) 物质点法空间离散 (a) 与计算流程 (b) of MPM.

Figure 2 (Color online) Spatial discretization (a) and calculation procedure (b) of MPM.

力. 公式 (1) 的等效积分形式为

$$\int_{\Omega} \rho w_i \dot{v}_i d\Omega = \int_{\delta\Omega_{\tau}} w_i \tau_i dS - \int_{\Omega} w_{i,j} \sigma_{ij} d\Omega + \int_{\Omega} \rho w_i b_i d\Omega, \quad (2)$$

式中, Ω 为研究域, $\delta\Omega_{\tau}$ 为应力边界, w_i 为任意的试函数, $\tau_i = \sigma_{ij} n_j$ 为应力边界条件, n_i 为边界外法向单位矢量, 上式推导中采用了高斯积分定理. 广义插值物质点法 (Generalized Interpolation Material Point Method, GIMP) 中^[14], 物质点 p 占据一定空间体积 V_p , 其特征函数 (Particle Characteristic Function) $\chi_p(x)$ 定义为

$$\chi_p(x) = \begin{cases} 1, & x \in V_p, \\ 0, & x \notin V_p. \end{cases} \quad (3)$$

对于任意连续函数 $f(x)$, 可空间离散为物质点特征函数加和的形式, 其中, $f(x)$ 在物质点处的取值 $f(x_p) \equiv f_p$ 作为权值, 即

$$f(x) = \sum_p f_p \chi_p(x). \quad (4)$$

采用背景网格节点的形函数将试函数进行空间离散, 即

$$w_i(x, t) = \sum_I N_I(x) w_{il}(t), \quad (5)$$

式中, 下标 I 代表背景网格节点, $N_I(x)$ 为背景网格节点 I 处的形函数, $w_{il}(t) = w_i(x_I, t)$ 为试函数在背景网格节点 I 处的取值. 采用公式 (4), 并将公式 (5) 带入公式 (2) 中, 可推得

$$\dot{p}_{il} = f_{il}^{\text{int}} + f_{il}^{\text{ext}}, \quad (6)$$

其中

$$\dot{p}_{il} = \sum_p \dot{p}_{ip} S_{Ip}, \quad (7)$$

$$f_{il}^{\text{int}} = - \sum_p \sigma_{ijp} S_{Ip,j} V_p, \quad (8)$$

$$f_{il}^{\text{ext}} = \sum_p m_p b_{ip} S_{Ip} + \int_{\delta\Omega_{\tau}} N_I(x) \tau_i(x) dS, \quad (9)$$

式中, $\dot{p}_{ip} = m_p \dot{v}_{ip}$ 为物质点动量矢量的时间变化率, m_p 为物质点的质量, $\sigma_{ijp} = \sigma_{ij}(x_p)$, $b_{ip} = b_i(x_p)$, x_p 为

物质点空间位置, S_{Ip} 为权函数, $S_{Ip,j}$ 为其导数, 定义分别为

$$S_{Ip} = \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p \cap \Omega} \chi_p(x) N_I(x) d\Omega, \quad (10)$$

$$S_{Ip,j} = \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p \cap \Omega} \chi_p(x) N_{I,j}(x) d\Omega. \quad (11)$$

公式 (6) 即为背景网格节点的控制方程, 更新后的背景网格节点的运动信息被映射回物质点, 物质点的速度与位置更新格式为

$$v_{ip}^{n+1} = v_{ip}^n + \Delta t \sum_I \dot{v}_{il}^{n+1} S_{Ip}^n, \quad (12)$$

$$x_{ip}^{n+1} = x_{ip}^n + \Delta t \sum_I v_{il}^{n+1} S_{Ip}^n, \quad (13)$$

式中, 上标 $n+1$ 与 n 代表迭代步, Δt 为时间步长.

2.2 离散元算法

颗粒离散元算法相对成熟, 但为保证论文完整性, 将其算法简述如下:

如图 3 所示, 球心位置分别为 O_1, O_2 的两个颗粒, 半径分别为 R_1, R_2 , 平动速度分别为 v_1, v_2 , 转动速度分别为 ω_1, ω_2 . 如果球心距离满足

$$|O_1 O_2| \leq R_1 + R_2, \quad (14)$$

则颗粒间存在接触, 接触法向为沿球心连线的单位

图 3 颗粒离散元接触判断

Figure 3 Contact model in DEM.

矢量, 即 $\mathbf{n} = \mathbf{O}_1\mathbf{O}_2/|\mathbf{O}_1\mathbf{O}_2|$, 接触重叠量为

$$\delta = R_1 + R_2 - |\mathbf{O}_1\mathbf{O}_2|. \quad (15)$$

接触点 C 的位置矢量定义为颗粒重叠中心位置, 即

$$\mathbf{OC} = \mathbf{OO}_1 + \frac{1}{2} [R_1 - R_2 + |\mathbf{O}_1\mathbf{O}_2|] \mathbf{n}. \quad (16)$$

两颗粒在接触点的相对速度为

$$\Delta \mathbf{v}^c = \mathbf{v}_1^c - \mathbf{v}_2^c = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\omega}_1 \times R_1 \mathbf{n} + \boldsymbol{\omega}_2 \times R_2 \mathbf{n}. \quad (17)$$

考虑颗粒阻尼, 此时, 法向接触力为

$$f_n = k_n \delta - \eta_n \Delta \mathbf{v}^c \cdot \mathbf{n}, \quad (18)$$

其中, k_n 为法向接触力, η_n 为阻尼系数. 计算切向接触力时, 采用增量算法, 并应用库仑摩擦进行修正, 其表达式为

$$f_t = \min(k_s (\mathbf{v}^c \cdot \mathbf{t}) \Delta t - \eta_s \Delta \mathbf{v}^c \cdot \mathbf{t}, \mu_s f_n), \quad (19)$$

其中, k_s 为切向刚度, $\mathbf{t}$ 为切向矢量, η_s 为切向阻尼系数, μ_s 为摩擦系数.

综上, 颗粒 1 受到的作用力与力矩分别为

$$\mathbf{f} = f_n \mathbf{n} + f_s \mathbf{t}, \quad \mathbf{M} = \mathbf{n} \times f_s \mathbf{t}, \quad (20)$$

需要指出, 颗粒间的接触本构是 DEM 算法的核心, 这里只关注多尺度建模的框架, 而不过多地涉及复杂颗粒接触本构, 因而选用最为简单的线性接触模型.

2.3 多尺度建模的关键点

在 MPM/DEM 多尺度建模时, 难点是如何通过颗粒接触反馈宏观应力? 此外, 代表性体积元的构建 (包括尺寸、颗粒级配、颗粒材料参数等)、大变形条件下应变度量、计算流程与程序实现等问题是进行 MPM/DEM 多尺度分析的关键点, 分别讨论如下:

(1) 代表性体积元的构建. 每一个宏观物质点对应一个颗粒集合构成的代表性体积元, 颗粒数目是多尺度建模中的一个关键问题. 颗粒较少, 构成的试样未达到代表性体积元尺寸时, 应力会在极小应变条件下发生剧烈波动, 无法表征稳定的应力应变关系,

而当颗粒较多时, 显著增加计算量. 通过对代表元进行各项同性加载, 研究特定颗粒数目的代表元中配位数的各向异性, 可以用以设定合理的颗粒数目. 在二维小变形条件下, 文献 [8] 选用 400 个分散颗粒构成高斯积分点. 为适应大变形条件, 如图 4 所示, 本文中每个代表性体积元中含有 900 个颗粒, 颗粒粒径均匀分布在 3–6 mm, 避免单一粒径在加载过程中形成晶状结构. 各边均采用周期边界, 以保证质量守恒. 颗粒的材料参数应通过实验率定, 本文直接采用文献 [8] 中颗粒的材料参数, 即, 密度为 2650 kg/m³, 弹性模量为 600 MPa, 泊松比 0.8, 表面摩擦系数为 0.5. 作为初始条件, 颗粒集合被各向同性压缩, 围压设定为一小值, 这里采用 5 Pa, 以保证颗粒初始紧密排布, 需要指出, 初始围压仅起到压实作用, 在重力作用下, 颗粒应力会根据变形进行调整.

(2) 应力传递. 颗粒介质的应力通常被分解为接触应力与动应力 [15], 其中动应力正比于颗粒脉动速度的二阶矩, $\sigma_{ij}^k \propto \langle v_i^k v_j^k \rangle$, 式中, $\langle \dots \rangle$ 为系综平均操作, v_i^k 为脉动速度, 在稀疏颗粒流中, 由于颗粒剧烈运动, 动应力十分重要. 考虑到应力分解的基础是对颗粒介质进行系综平均, 而在多尺度建模过程中, 颗粒集合对外力的抵抗来自瞬时构型, 且应力是实时更新, 因而, 离散元计算只需返回单元内的平均接触应力, 即柯西应力

$$\sigma_{ij} = \frac{\phi}{\sum_{N_p} V_p} \sum_{N_p} \sum_{N_c} |\mathbf{x}_i^c - \mathbf{x}_j^p| \mathbf{n}_i^{c,p} F_j^c, \quad (21)$$

图 4 (网络版彩图) 若干颗粒组成的代表体积元
Figure 4 (Color online) Sample of RVE.

式中, ϕ 为颗粒的体积分数, N_p 为颗粒数目, N_c 为接触数目, $\mathbf{x}_i^c$, $\mathbf{x}_i^p$ 分别为接触点与颗粒质心位置矢量, $\mathbf{n}_i^{c,p}$ 为质心到接触点连线的单位法向, $\mathbf{F}_j^c$ 为接触力矢量. 公式 (21) 是各颗粒所受应力在颗粒集合所占体积的空间平均, 是通过均化处理对宏观变形的应力反馈.

(3) 应变度量. 宏观计算中, 物质点向代表性体积元传递变形梯度, 无需假定唯象本构, 因而无需计算应变, 但合适的应变度量对结果的分析十分重要, 比如, 通过对剪应变的分析, 确定结构发生剪切破坏的起始位置. 考虑到柯西应力与变形率是功率共轭的, 因而选用欧拉描述下的 Almansi 应变作为应变度量, 即

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (\mathbf{u}_{i,j} + \mathbf{u}_{j,i} - \mathbf{u}_{k,i} \mathbf{u}_{k,j}), \quad (22)$$

式中, $\mathbf{u}_i$ 代表位移矢量. 需要指出, 适用于小变形假定下的线应变, 已无法客观反映结构的大变形情况, 因而必须舍弃.

2.4 计算流程与程序实现

采用物质点法与离散元法进行多尺度建模的主要计算流程为

- (1) 将物质点信息映射至背景网格节点, 如公式 (7);
- (2) 计算节点内力、外力, 如公式 (8) 和 (9);
- (3) 更新背景网格节点动量等信息, 如公式 (6);
- (4) 计算物质点处的变形梯度;
- (5) 将变形梯度作为边界条件输入到离散元计算中, 返回柯西应力, 如公式 (21).
- (6) 更新物质点的动量、位移信息, 如公式 (12) 和 (13);
- (7) 进行下一步计算.

物质点法程序是通过 C++ 编写得到, 而颗粒离散元的计算依托开源软件 YADE 实现 [16], 由于 YADE 的命令是基于 PYTHON 语言, 因而, 需要实现 C++ 与 PYTHON 间的语言调用与信息互换. 此外, 考虑到每个物质点是由颗粒集合构成, 因而采用 MPI 框架实现多 CPU 的并行化, 加速计算.

3 沙堆倒塌算例

如图 5(a) 所示, 在沙堆倒塌算例中, 初始沙堆被挡板限制在一定区域内, 当移除挡板, 沙堆在重力作用下发生流动, 直至到达一定角度静止 (对应图 5(a) 中角 θ). 从时间看, 该过程是从稳定到流动再到静止的过程, 在空间上看, 由于存在静止区 (图 5(a) 中角 ϕ 所对应区), 因而是类固态、类液态的颗粒介质比重不断变化的过程. 沙堆倒塌包含颗粒介质的不同力学状态与行为, 非常适合研究大变形条件下的多尺度建模. 此例, 初始颗粒被限定在宽 10 cm, 高 20 cm 的矩形区域, 背景网格的尺寸为 1 cm, 每个背景网格初始含有 4 个物质点, 因而, 共 800 个物质点进行计算, 每个物质点独立对应一个由 900 颗粒构成的代表性体积元.

通过反复迭代, 图 5(b) 反映了初始被限定的沙堆垂向应力分布, 可以看出, 压应力随深度增加而变

图 5 (网络版彩图) 计算示意图及初始应力和力链分布. (a) 沙堆倒塌计算示意图; (b) 初始垂向应力分布及顶端和低端物质点处的力链网络 (右侧)

Figure 5 (Color online) Numerical model and distribution of vertical stress. (a) Schematic of collapse of sand pile; (b) the distribution of vertical stress in initial state and force chain networks at bottom and top locations of the sand pile.

大,且在水平向分布均匀.图5(b)右侧分别为顶端与低端两个物质点所含的颗粒集合所构成的力链网络,可以看出,底部的颗粒力链更密集,图中颜色反映了接触力的大小,顶端与低端最大接触力数值相差30倍,宏观应力的差异在微观接触的角度得到了很好验证;MPM/DEM多尺度建模,将宏细观进行关联,有效描述颗粒体系类固态的力学行为.

图6为沙堆倒塌过程中数值模拟与试验结果的对比,其中,数值模拟结果是通过垂向位移的演化表示,最大垂线位移达16 cm,考虑到颗粒集合原始高度为20 cm,因而是典型的大变形问题,若采用有限元计算该过程会发生网格畸变,甚至造成计算崩溃.图例中,红色代表位移较小,关注沙堆最后堆积形态,可以明显看出,在倒塌过程中,存在相对稳定的区域,与图5(a)中角 φ 所对应部分相一致.通过对比试验记录的颗粒流动过程中形态的演化,可以看出,采用物质点法与离散元法进行多尺度建模,未引入任何唯象本构,可以有效地模拟整个沙堆的坍塌过程,颗粒材料的类固态-类液态的力学行为被自然描述.

为更好地说明多尺度建模可将宏细观进行关联,关注颗粒倒塌瞬时(如0.1 s),按公式(22)度量的应变所对应的等效剪应变(偏应变的第二不变量的开方)分布,如图7所示.可以看出,剪切变形最初在右侧底部集中,进而演化至全域.插图分别显示不同位置的代表性体积元的颗粒集合构型与对应的力链网络.左下方位置,由于颗粒近乎静止,因而代表性体积元变形不大,但相对于初始应力分布,由于缺少水平向位移约束,力链网络主要沿垂向;右下方位置,由于

图6 (网络版彩图) 沙堆倒塌过程试验结果(a)与数模结果(b)对比

Figure 6 (Color online) Comparison of experimental result (a) and simulation result (b).

图7 (网络版彩图) $t=0.1$ s 等效剪应变分布与不同位置颗粒集合构型与力链网络

Figure 7 (Color online) The distribution of equivalent plastic strain at 0.1 s and force chain networks at different locations.

缺少约束,发生较大变形,颗粒相对稀松,几乎没有颗粒接触,以抵抗外界变形;右上方位置,在此时刻,变形程度剧中,力链网络主要方向与剪切倒塌方向垂直,因而可以反映出在剪切倒塌方向已无力链支撑.综上,可以看出,剪切变形与力链网络相协调,失稳往往发生在没有接触抵抗的方向.

4 讨论与结果

本文尝试构建适用于颗粒大变形条件下的多尺度建模框架,宏观计算采用物质点法,微观分析借助离散元法,宏观计算所得颗粒集合的变形作为边界条件输入,反馈颗粒接触应力在域内平均得到的柯西应力进行宏观计算,模拟了沙堆倒塌,主要有以下发现:

(1) 重力作用下,初始应力场的构建过程中,颗粒集合的类固态行为被有效刻画,应力分布与接触力链网络相协调;

(2) 颗粒流动过程中,类固态和类液态的力学行为被自然描述,流动过程存在稳定区;

(3) 颗粒骨架抵抗变形的能力是宏观剪切变形的内禀因素,结构不均匀性导致动力学响应的不均匀性.

本文发展的MPM/DEM多尺度建模,摒弃了唯象本构,仅通过可测的颗粒弹性模量、泊松比以及

摩擦系数,即可描述颗粒体系的力学行为,因此物理图像更为清晰,结果可信;由于物质点法为无网格方法,质点间通过背景网格节点相联系,特别适合大变形问题,可对颗粒介质流动行为进行描述,且模拟过程相对简单,无需构建复杂拓扑关系与位移插值函数;由于接触应力直接映射到背景网格节点,影响其运动,无需组成刚度矩阵,省却了求解高阶非线性方程组,计算效率得到有效提高;控制方程建立在背景网格节点上,位移边界自然引入,无需虚设固定质点.

与其他任何建模一样,MPM/DEM多尺度建模也存在缺陷.采用背景网格节点的形函数作为权函数,只为一阶连续,当有物质点穿越网格时,会产生数值振荡,纵使广义插值物质点法通过构建特殊的物质点

特征函数,将权函数的空间导数连续化,但物质点法的精度远低于有限元的高阶单元;物质点法作为无网格方法,研究域的边界并不十分明确,常用做法是将临近边界的物质点所在网格的边界作为研究域的边界,当施加应力边界时,背景网格受力并不能体现出物质点的空间位置差异引起的不同,在小变形条件下,这种误差并不明显,但当边界物质点发生较大位移时,应力的施加在物质点上的反馈就不十分准确,因而,物质点法应用到准静态的三轴压缩实验中,以描述试样屈服、直至断裂过程,仍比较困难.

综上,整体看来,采用物质点法与离散元法进行颗粒介质的多尺度建模,可将单元颗粒与宏观体系进行关联,适用于对于精度要求不苛刻的大变形问题,为颗粒介质的力学研究提供了新思路.

参考文献

- 1 Jaeger H M, Nagel S R, Behringer R P. Granular solids, liquids, and gases. *Rev Mod Phys*, 1996, 68: 1259–1273
- 2 Wang W H. The nature and properties of amorphous matter (in Chinese). *Prog Phys*, 2013, 33: 177–351 [汪卫华. 非晶态物质的本质和特性. *物理学进展*, 2013, 33: 177–351]
- 3 Sun Q C, Wang G Q. Introduction to the Mechanics of Granular Materials (in Chinese). Beijing: Science Press, 2009 [孙其诚, 王光谦. 颗粒物质力学导论. 北京: 科学出版社, 2009]
- 4 Li X, Wan K. A bridging scale method for granular materials with discrete particle assembly-cosserat continuum modeling. *Comput Geotech*, 2011, 38: 1052–1068
- 5 Li G X. Characteristics and development of Tsinghua elasto-plastic model for soil (in Chinese). *Chin J Geotech Eng*, 2006, 28: 1–10 [李广信. 土的清华弹塑模型及其发展. *岩土工程学报*, 2006, 28: 1–10]
- 6 Andrade J, Avila C, Hall S, et al. Multiscale modeling and characterization of granular matter: From grain kinematics to continuum mechanics. *J Mech Phys Solids*, 2011, 59: 237–250
- 7 Li X, Yu H S. Particle-scale insight into deformation noncoaxiality of granular materials. *Int J Geomech*, 2013, 15: 04014061
- 8 Guo N, Zhao J. A coupled fem/dem approach for hierarchical multiscale modelling of granular media. *Int J Numer Methods Eng*, 2014, 99: 789–818
- 9 Nguyen T, Combe G, Caillerie D, et al. Fem $\times$ dem modelling of cohesive granular materials: Numerical homogenisation and multi-scale simulations. *Acta Geophys*, 2014, 62: 1109–1126
- 10 Wang Y, Lu Y, Ooi J Y. A numerical study of wall pressure and granular flow in a flat-bottomed silo. *Powder Tech*, 2015, 282: 43–54
- 11 Zhang X, Krabbenhoft K, Pedrosa D, et al. Particle finite element analysis of large deformation and granular flow problems. *Comput Geotech*, 2013, 54: 133–142
- 12 Bui H H, Fukagawa R, Sako K, et al. Lagrangian meshfree particles method (sph) for large deformation and failure flows of geomaterial using elastic-plastic soil constitutive model. *Int J Numer Anal Methods Geomech*, 2008, 32: 1537–1570
- 13 Ma S, Zhang X, Qiu X. Comparison study of mpm and sph in modeling hypervelocity impact problems. *Int J Impact Eng*, 2009, 36: 272–282
- 14 Bardenhagen S, Kober E. The generalized interpolation material point method. *Comput Mod Eng Sci*, 2004, 5: 477–496
- 15 Campbell C S. Granular material flows—An overview. *Powder Tech*, 2006, 162: 208–229
- 16 Kozicki J, Donz é F. Yade-open dem: An open-source software using a discrete element method to simulate granular material. *Eng Comput*, 2009, 26: 786–805

Multi-scale modelling for granular materials using material point method and discrete element method

LIU ChuanQi, SUN QiCheng* & JIN Feng

Key Laboratory of Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Granular materials are composed by discrete particles, which are often observed in geo-hazards, such as debris flows. It is difficult to establish unified constitutive relations to describe the multiple-state properties of granular materials, i.e., solid- and fluid-like states and in-between transitions. In this study, a hierarchical multi-scale modelling scheme is developed based on the concept of black box theme. The macroscopic behavior is modelled by using material point method (MPM), which is suitable for large deformation treatment, while the constitution relations at each material point are extracted from discrete element method (DEM) modelling. By using the MPM/DEM modelling, the collapse of a sand pile is simulated and compared with experiments. The correlations between macroscopic phenomenons and microscopic network of force chain are illustrated. This MPM/DEM multi-scale modelling does not need any constitutive relations, and facilitates effective cross-scale interpretation and understanding of granular flow behaviors. It provides a potential approach to study the multiple states and large deformations of granular materials, especially when the constitutive relations cannot be expressed explicitly.

granular materials, multi-scale modelling, discrete element method, material point method, sand-pile collapse

PACS: 45.70.-n, 02.60.-x, 45.70.Ht

doi: 10.1360/SSPMA2016-00394