

颗粒材料多尺度分析的连接尺度方法¹⁾

李锡夔²⁾ 万 柯

(大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 大连 116024)

摘要 提出了耦合细尺度上基于离散颗粒集合体模型的离散单元法 (DEM) 和粗尺度上基于 Cosserat 连续体模型的有限元法 (FEM) 的连接尺度方法 (BSM) 以研究颗粒材料的力学行为. 采用 Cosserat 连续体模型和 FEM 模拟的粗尺度域覆盖全域, 而采用离散颗粒集合体模型的 DEM 模拟的细尺度域仅限于需特别关注材料微结构演变和非连续变形行为的局部区域. 对这两个区域间的界面提出了适当的界面条件及其实施方案. 通过采用适当的连接尺度投影算子, 空间离散的粗、细尺度耦合系统多尺度运动方程具有解耦的特点, 并且允许分别求解, 因而也允许分别采用不同时间步长对粗、细尺度进行计算, 可极大地提高 BSM 的计算效率. 二维地基数值算例结果说明了所陈述方法的可应用性, 以及相对基于 Cosserat 连续体模型的 FEM 和基于离散颗粒集合体模型的 DEM 的优越性.

关键词 颗粒材料, 连接尺度方法, 离散单元法, Cosserat 连续体, 多尺度

中图分类号: O242.1, TU431 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2010)05-0889-12

引 言

从细观和宏观两个尺度分别审视颗粒材料的力学行为导致它的两个不同模型. 细观模型试图由材料的离散颗粒集合体这一微结构特征描写其本构行为. 而宏观模型则视颗粒材料为多孔连续介质, 并在此基础上唯象地构造材料的本构模型. 基于离散颗粒集合体模型的离散单元法 (discrete element method, DEM) 已被普遍认为是在细观尺度上研究颗粒材料力学行为的一个有效途径. Cosserat 连续体考虑了旋转自由度及其空间梯度, 在颗粒材料多尺度分析中把基于 Cosserat 连续体的宏观模型与基于颗粒集合体的细观模型结合起来是自然和合适的选择.

离散颗粒集合体模型已成功地模拟颗粒材料的塑性、破碎等破坏模式^[1-3]. 然而, 由于颗粒数量过于巨大和和应用 DEM 时要求时间步长过于短小, 因而该模型不适合于单独用于大多数实际工程问题的分析. 基于 Cosserat 连续体模型的有限元法 (finite element method, FEM) 在颗粒材料的宏观分析中已显示了它的优势^[4-6], 它比 DEM 花费少得多的计算时间和存储空间. 然而 Cosserat 连续体模型不能描述颗粒材料局部区域破坏时所发生的非连续性力学行为和反映其间相联系的材料微结构演化^[7-9].

最初由 Cundall 和 Strack^[10] 提出的 DEM 已被普遍认为是从细观尺度研究颗粒材料力学行为的有效方法. Bardet 等^[11] 给出了一个对 DEM 的自适应动态松弛算法, 给出了在准静态颗粒研究中优化的时间步长和人工阻尼因子. 基于对颗粒间法向、切向接触力和接触力矩的不同描述, 先后发展了若干不同模型. Iwashita 和 Oda^[12] 在 Cundall 接触模型的基础上引入了滚动摩擦阻矩, 考虑了颗粒之间的滚动机制. Feng 等^[13] 具体讨论了滚动摩擦阻力在正确模拟颗粒体系力学行为中的重要性. Li 和 Chu^[2] 的颗粒接触模型考虑了滚动和滑动摩擦力及力矩. 本文工作中采用了 Li 和 Chu 提出的离散颗粒模型.

引入了旋转自由度及其一阶梯度的 Cosserat 连续体理论在近几十年来得到了快速发展^[14], 并在模拟颗粒材料应变局部化等力学现象中显示了很好效果^[4-6]. 基于多尺度分析中的平均场理论和虚功原理, 人们已导出由细观尺度上颗粒集合体微结构及颗粒间接触响应量表示的 Cosserat 连续体中包括 Cauchy 应力张量和偶应力张量、位移梯度张量和转角梯度张量的表达式^[15-17], 给出了由颗粒集合体中颗粒间接触本构模型和表征颗粒介质结构性质的结构张量表示的 Cosserat 连续体本构模型及模型参数^[18-19]. Walsh 和 Tordesillas^[20] 则在多尺度热力

2009-05-20 收到第 1 稿, 2009-09-28 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金 (90715011, 10672033) 和国家重点基础研究发展计划 (973)(2010CB731502) 资助项目.

2) E-mail: xikuili@dlut.edu.cn

学框架内导出了颗粒材料的 Cosserat 连续体本构模型.

Wagner 和 Liu^[21] 首先提出了在细尺度上采用分子动力学模型和在宏观尺度上采用 Cauchy 连续体模型的连接尺度方法 (bridging scale method, BSM). Liu 等^[22] 在应用 BSM 时把分子动力学模型的计算域局限于可能需要的局部化区域, 而对问题的全域则采用 Cauchy 连续体模型的有限元粗网格离散.

本文工作的贡献在于把以纳米材料为背景而提出的基于分子动力学-经典 Cauchy 连续体细宏观尺度模型的 BSM 移植和发展成为针对颗粒材料、基于离散颗粒集合体-Cosserat 连续体细宏观尺度模型的 BSM. 在所发展的 BSM 中提出了处理离散颗粒集合体模型和 Cosserat 连续体模型界面处界面条件的耦合算法; 包括平移和转动的颗粒位移分解成了可以由有限元形函数多项式插值表示的粗尺度部分, 和在粗尺度基上投影为零的细尺度部分. 基于连接尺度投影算子的粗细尺度分解与 Hughes 等^[23] 在固体力学变分多尺度方法、Walsh 和 Tordesillas^[20] 在颗粒材料热力学本构分析中用到的位移分解类似. 定义连接尺度投影算子的准则是使总动能的粗细尺度部分解耦, 即总动能、或总动力虚功可分解为粗、细尺度的动能或动力虚功之和, 并由此得到解耦表示的颗粒材料多尺度运动方程.

假设仅对颗粒材料中局部区域的细观和非连续体行为感兴趣. 计算全域分为两个嵌套的部分: 以宏观的连续体模型描述, 采用有限元法数值模拟的全域 (以 MS 区域表示); 和仅限于全域中的部分区域, 以细观的离散颗粒集合体模型描述和采用有限元法数值模拟的局部域 (以 DEM 区域表示). 限于考虑缓慢加载情况, 即在静力或拟静力载荷下颗粒材料结构的响应, 本文工作中略去了介质中 DEM 区域与 MS 区域的界面上的波反射等波动效应, 并相应地提出了适当且高效的界面条件. 为克服连接尺度方法应用到颗粒材料计算中的难点, 对于 DEM 区域边界与全域边界重合的情况提出了在细尺度 DEM 计算中适当的边界条件, 并且对于粗尺度的 Cosserat 连续体全域有限元计算中采用了基于宏、细观多尺度分析平均场理论导出的唯象本构模型参数.

1 连接尺度方法基础

1.1 粗细尺度位移分解

考虑二维问题中含有 n_p 个颗粒的离散颗粒集合体, 颗粒 α 的位移向量 \mathbf{u}_α 可写为

$$\mathbf{u}_\alpha^T = \{u_x^\alpha \ u_y^\alpha \ \omega^\alpha\} \quad (1)$$

其中 u_x^α , u_y^α 和 ω^α 分别表示颗粒 α 沿 x, y 轴向线上位移和绕 z 轴转角.

维数为 $3n_p$ 的总位移向量 \mathbf{u} 由每个颗粒 α 的位移 \mathbf{u}_α 排列而成, 连接尺度方法的基本思想是把 \mathbf{u} 分解为粗细尺度两部分^[21-22]

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}'(\mathbf{x}) \quad (2)$$

其中粗尺度位移 $\bar{\mathbf{u}}$ 是由一组基函数表示的那部分解, 基函数可以是有限元的形函数. 细尺度位移 \mathbf{u}' 定义为粗尺度基函数上投影为零的那部分解, 即隐含了粗细尺度位移解的正交性.

粗尺度位移可以由定义于有限元或无网格法节点的独立离散位移值的假定连续位移场插值表示. 设有 n_c 个定义为粗尺度节点的有限元或无网格法节点, 颗粒粗尺度位移由维数为 $3n_c$ 的有限元或无网格法节点位移 \mathbf{d} 及颗粒位置坐标插值表示为^[21-22]

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{N}\mathbf{d} = \mathbf{P}\mathbf{q} \quad (3)$$

其中形函数矩阵 \mathbf{N} 中列出了各个节点 I 在各个颗粒 α 位置坐标上取值的形函数 N_I^α , 它的维数为 $3n_p \times 3n_c$. 它同时可以由 DEM 区域中离散元模型确定的颗粒位移向量 \mathbf{q} 及其到粗尺度基上定义为

$$\mathbf{P} = \mathbf{N}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}^T\mathbf{M}_p \quad (4)$$

的投影算子 \mathbf{P} 表示. 上式中 \mathbf{M}_p 是颗粒总质量矩阵, 它的维数为 $3n_p \times 3n_p$. 维数为 $3n_c \times 3n_c$ 的粗尺度质量矩阵 \mathbf{M} 定义为

$$\mathbf{M} = \mathbf{N}^T\mathbf{M}_p\mathbf{N} \quad (5)$$

细尺度位移 \mathbf{u}' 作为在位移 \mathbf{q} 中不能由粗尺度投影表示的那部分解可写为

$$\mathbf{u}' = \mathbf{Q}\mathbf{q} \quad (6)$$

其中补投影算子 \mathbf{Q} 表示为

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I} - \mathbf{P} \quad (7)$$

将式 (3) 和 (6) 代入式 (2), 总位移 \mathbf{u} 的分解可进一步表示为

$$\mathbf{u} = \mathbf{N}\mathbf{d} + \mathbf{Q}\mathbf{q} \quad (8)$$

1.2 多尺度运动方程

根据牛顿第二定理, 颗粒 α 的动力平衡方程可

表示为如下形式

$$m_\alpha \ddot{u}_\alpha + c_m m_\alpha \dot{u}_\alpha = f_{\text{int}}^\alpha + f_{\text{ext}}^\alpha \quad (9)$$

其中 f_{int}^α 是域内与颗粒 α 相接触的所有颗粒对其作用力在其形心点的合力. f_{ext}^α 表示外界对颗粒 α 的作用力, 包括体力、边界力等. c_m 为质量阻尼系数, 对于缓慢加载的准静态问题, 选择适当的质量阻尼对问题的收敛十分有效^[11]. 域内所有离散颗粒的动力平衡方程可写成

$$M_p \ddot{u} + c_m M_p \dot{u} = F_{\text{int}} + F_{\text{ext}} \quad (10)$$

等式 (10) 两边前乘颗粒虚位移向量 δu , 可得到颗粒集合体的“离散”虚功方程

$$\begin{aligned} \delta W^d &= \delta u^T M_p \ddot{u} + c_m \delta u^T M_p \dot{u} - \\ &\delta u^T (F_{\text{int}} + F_{\text{ext}}) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

其中 δW^d 的上标 d 表示离散系统的虚功.

由于连接尺度的投影算子满足如下关系

$$N^T M_p Q = Q^T M_p N = 0 \quad (12)$$

并将颗粒位移分解式 (8) 代入式 (11), 可得到解耦后的颗粒离散虚功表达式

$$\begin{aligned} \delta W^d &= \delta d^T M \ddot{d} + c_m \delta d^T M \dot{d} - \\ &\delta d^T N^T (F_{\text{int}} + F_{\text{ext}}) + \delta q^T M \ddot{q} + \\ &c_m \delta q^T M \dot{q} - \delta q^T Q^T (F_{\text{int}} + F_{\text{ext}}) = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

其中细尺度质量矩阵 M 定义成

$$M = Q^T M_p Q = Q^T M_p \quad (14)$$

由式 (11) 所示的离散虚功方程, 并根据 Q 是奇异矩阵^[22], 可导出两组颗粒运动方程

$$M_p \ddot{q} + c_m M_p \dot{q} = F_{\text{int}}(q, \dot{q}) + F_{\text{ext}} \quad (15)$$

$$M \ddot{d} + c_m M \dot{d} = N^T (F_{\text{int}}(u, \dot{u}) + F_{\text{ext}}) \quad (16)$$

方程 (15) 和 (16) 就是耦合的多尺度运动方程. 其中细尺度运动方程 (15) 可利用标准的 DEM 求解过程, 并得到离散颗粒集合体中各颗粒位移 q , 而粗尺度运动方程 (16) 为离散化后的 Cosserat 连续体动力平衡方程, 本文中采用有限元法求解.

1.3 粗细尺度域的划分和 DEM 计算边界条件

图 1 示意地给出了连接尺度方法中粗细尺度域划分. 计算全域分为两个嵌套的部分: 以宏观的

Cosserat 连续体模型描述, 采用有限元法数值模拟的全域 (以 MS 区域表示); 以细观的离散颗粒集合体模型描述和采用离散元法数值模拟的局部域 (图中以阴影区域表示 DEM 域).

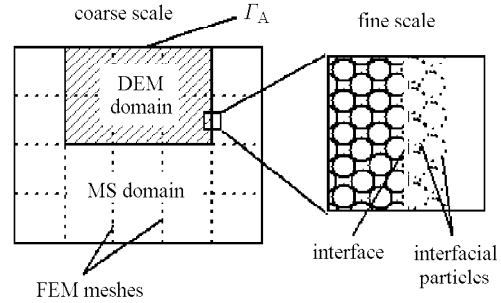


图 1 粗、细尺度域的划分和界面颗粒示意图

Fig.1 Coarse-fine scale domain decomposition and interfacial particles

连接尺度方法的核心问题是粗尺度域对细尺度域界面作用, 也即细尺度域边界条件的正确描述.

Liu 等^[21-22] 提出了动力条件下用以表示粗尺度域在其与分子动力学 (molecular dynamics, MD) 域界面处作用于 MD 域细尺度的多尺度界面条件的时间积分核 (time history kernel) 函数, 通过保存先前每个时间步在界面上的信息, 得到了一个关于时间卷积积分的对细尺度边界的作用力. 此界面条件有效地消除了界面处的病态波反射. 然而该工作假设了界面处微结构为周期规则排列, 并且为了得出时间历程核函数的解析表达式, 限制了界面处微元体的相互作用只能为线弹性. 本文工作主要针对缓慢加载的准静态问题, 因而可略去界面处的波反射问题而提出更加合适的界面条件.

为考虑 MS 域对嵌套在其内的 DEM 域的界面作用, 在 DEM 域周边颗粒的外围, 即 MS 域与 DEM 域的界面处配置一层虚拟的界面颗粒, 如图 1 右侧图部分中用虚线绘制的颗粒所示. 所谓虚拟的界面颗粒指这些颗粒的细尺度位移为零, 即界面颗粒的位移完全由 MS 域有限元网格节点位移插值确定

$$u_{\text{int}}(t) = \bar{u}_{\text{int}}(t) = \sum_I N_I^{\text{int}} d_I(t) \quad (17)$$

值得注意的是, 虽然 DEM 域嵌套在 MS 域内, 但其与 MS 域的界面的一部分可能位于全域 (MS 域) 的边界上, 如图 1 左侧图部分的 DEM 域顶部界面 Γ_A . 这部分界面处无需、也不可能配置虚拟界面颗粒. Γ_A 作为全域边界的一部分, 可分属于指定位

移边界 Γ_u 或指定力边界 Γ_t 的一部分. 作为 DEM 域的边界 Γ_A 处的边界条件应区别这两种不同边界类型分别分析给出.

对于 $\Gamma_A \in \Gamma_u$ 将假设一与 Γ_A 贴合的刚性板, 并通过对刚性板施加指定位移实施对与刚性板接触的 DEM 域颗粒的指定位移边界条件.

而对于 $\Gamma_A \in \Gamma_t$, 基于由 DEM 域周边颗粒与边界 Γ_A 接触而成的离散接触点构造的, 在边界 Γ_A 的插值函数 $N_\alpha^I(\mathbf{x}_I)$, 其中 $N_\alpha^I(\mathbf{x}_I)$ 表示对应颗粒 α 与边界 Γ_A 接触点的插值函数, 在边界点坐标 \mathbf{x}_I 处的取值, 则可把作用于 Γ_A 处的边界指定面力 $\bar{\mathbf{t}}(\mathbf{x}_I, t)$ 离散到与 Γ_A 接触的 DEM 域周边颗粒上. 通过接触点作用于颗粒 α 的指定力可表示为

$$\mathbf{t}_\alpha = \int_{\Gamma_t} N_\alpha^I(\mathbf{x}_I) \bar{\mathbf{t}}(\mathbf{x}_I, t) dS \quad (18)$$

其中 $\bar{\mathbf{t}}(\mathbf{x}_I, t)$ 表示 t 时刻在边界 Γ_A 上坐标 \mathbf{x}_I 处的指定单位面积边界力.

值得提及的是, 在以原子尺度力学为背景的多尺度计算方法——准连续介质力学方法 (quasicon- tinuum, QC) 中, 在高变形梯度 (细尺度分析) 区采用表征原子能量的非局部模型, 而在其余 (粗尺度分析) 区域则采用局部模型^[24], 因而导致在粗、细尺度分析区域界面附近产生无物理意义的虚假力 (ghost force). 而在本文的连接尺度方法中, 在细尺度分析区中采用的离散颗粒集合体模型是局部的, 在粗尺度区域中任一物质点的运动与细分析区域中一个典型颗粒的能量无关, 因而在粗、细尺度分析区域界面附近不存在虚假力.

2 Cosserat 连续体 - 离散颗粒集合体模型 的连接尺度方法实现

2.1 离散颗粒集合体模型

DEM 域内颗粒的粗细尺度运动方程分别由式 (15) 和 (16) 给出, 为求解这两个方程均需要计算颗粒内力 \mathbf{F}_{int} , 它表示作用于某一颗粒的接触力在其形心处的合力, 由此需引入能合理地计算接触力的离散颗粒模型. 本文工作采用了 Li 和 Chu^[2] 提出的离散颗粒模型.

颗粒间接触力的计算基于接触颗粒间相对运动的运动学分析. 颗粒间接触力包括法向接触力 F_N , 切向滑动摩擦力 F_s , 切向滚动摩擦力 F_r 和滚动摩擦力矩 M_r , 可分别由接触颗粒的相对法向位移 u_N^t 和速率 \dot{u}_N , 相对切向滑动位移增量 Δu_s 和速率 \dot{u}_s , 相

对切向滚动位移增量 Δu_r 和速率 \dot{u}_r , 相对滚动角位移增量 $\Delta \omega_r$ 和速率 $\dot{\omega}_r$ 根据一定的非线性本构关系确定.

2.2 粗尺度域中的 Cosserat 连续体模型

颗粒材料连接尺度方法中的粗尺度位移解由 Cosserat 连续体模型^[14] 的有限元求解过程确定. 对于平面应变问题, 各向同性弹性 Cosserat 连续体本构关系可以表示为如下形式

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}_e \boldsymbol{\varepsilon} \quad (19)$$

其中各向同性弹性模量矩阵 \mathbf{D}_e 可以表示为

$$\mathbf{D}_e = \begin{bmatrix} \lambda + 2G & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2G & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2G & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G + G_c & G - G_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G - G_c & G + G_c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G \end{bmatrix} \quad (20)$$

其中 $\lambda = 2Gv/(1 - 2v)$ 表示 Lamè 常数, G 和 v 分别表示剪切模量和泊松比, G_c 表示 Cosserat 剪切模量.

各向同性颗粒材料的弹性本构参数 λ, G, G_c 和 Cosserat 连续体特征参数 l_c 可由宏观实验方法得到, 也可基于多尺度方法和颗粒材料微结构参数导出反映材料微结构特征的宏观本构模量参数^[14-15] 如下

$$G = \frac{Nr^2}{2V} (2k_N + 3k_s) \quad (21)$$

$$\lambda = \frac{Nr^2}{2V} (k_N - k_s) \quad (22)$$

$$G_c = \frac{2Nr^2}{3V} k_s \quad (23)$$

$$l_c = \sqrt{\frac{4(2L^2 k_s + r^2 k_r + k_\omega)}{3(k_N + k_s)}} \quad (24)$$

式中 k_N, k_s, k_r 和 k_ω 分别表示颗粒的法向力刚度系数、切向滑动力刚度系数、切向滚动力刚度系数和滚动阻矩刚度系数, N 表示在本构分析时所取表征元 (representative volume element, RVE) 内颗粒接触数, V 和 L 分别表示 RVE 的体积和特征尺寸.

2.3 时间积分算法

注意到连接尺度方法的突出优点：允许对细、粗尺度计算采用不同的时间步长以提高计算效率。本工作当粗尺度计算完成一时间步长为 Δt 的增量步时，细尺度的离散元计算中将执行 m 个时间步长为 $\Delta t/m$ 的增量步。

2.3.1 细尺度离散颗粒模型中颗粒运动学量的更新

细尺度离散颗粒模型中颗粒运动学量计算依赖于由粗尺度计算给定的 DEM 区域边界条件，因此在每次更新 DEM 位移 \mathbf{q} 之前须更新粗尺度计算确定的离散颗粒集合体的边界颗粒位移 $\bar{\mathbf{u}}_{\text{int}}$ 。以上标 $[j]$ 表示由时刻 t_n 开始至 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ 的细尺度计算的第 j 个时间子步，即 $[j] = t_n + j\Delta t_m$ ，其中 $\Delta t_m = \Delta t/m$ 。假设时刻 t_n 下的 DEM 域颗粒细尺度位移 \mathbf{q}^n ，速度 $\dot{\mathbf{q}}^n$ ，加速度 $\ddot{\mathbf{q}}^n$ ，DEM 域界面颗粒位移 $\bar{\mathbf{u}}_{\text{int}}^n$ ，速度 $\dot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^n$ ，加速度 $\ddot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^n$ 已知，这些运动学量的更新可表示如下

$$\bar{\mathbf{u}}_{\text{int}}^{[j+1]} = \bar{\mathbf{u}}_{\text{int}}^{[j]} + \Delta t_m \dot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^{[j]} + \frac{1}{2} \Delta t_m^2 \ddot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^n \quad (25)$$

$$\dot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^{[j+1]} = \dot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^{[j]} + \Delta t_m \ddot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^n \quad (26)$$

$$\mathbf{q}^{[j+1]} = \mathbf{q}^{[j]} + \Delta t_m \dot{\mathbf{q}}^{[j]} + \frac{1}{2} \Delta t_m^2 \ddot{\mathbf{q}}^{[j]} \quad (27)$$

$$\dot{\mathbf{q}}^{[j+1]} = \dot{\mathbf{q}}^{[j]} + \Delta t_m \ddot{\mathbf{q}}^{[j]} \quad (28)$$

$$\ddot{\mathbf{q}}^{[j+1]} = [\mathbf{M}_p^{-1} (\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{q}^{[j+1]}, \dot{\mathbf{q}}^{[j+1]}, \bar{\mathbf{u}}_{\text{int}}^{[j+1]}, \dot{\bar{\mathbf{u}}}_{\text{int}}^{[j+1]}) + \mathbf{F}_{\text{ext}}) - c_m \dot{\mathbf{q}}^{[j]} - c_m \Delta t_m \ddot{\mathbf{q}}^{[j]} / 2] / (1 + c_m \Delta t_m / 2) \quad (29)$$

$$\dot{\mathbf{q}}^{[j+1]} = \dot{\mathbf{q}}^{[j]} + \frac{1}{2} \Delta t_m (\ddot{\mathbf{q}}^{[j]} + \ddot{\mathbf{q}}^{[j+1]}) \quad (30)$$

式(28)中所示 $\dot{\mathbf{q}}^{[j+1]}$ 为 $\dot{\mathbf{q}}^{[j+1]}$ 的预测值，并被用于计算当前时间子步下作用于离散颗粒的接触力合力。

2.3.2 粗尺度有限元模型节点运动学量的更新

连接尺度方法的优点允许粗尺度有限元模型节点位移 \mathbf{d} ，速度 \mathbf{v} 和加速度 \mathbf{a} 在大时间步长 Δt 下、即由时刻 t_n 至 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ 的更新。时刻 t_{n+1} 的粗尺度有限元节点运动学量可表示为

$$\mathbf{d}^{n+1} = \mathbf{d}^n + \Delta t \mathbf{v}^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{a}^n \quad (31)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \Delta t \mathbf{a}^n \quad (32)$$

$$\mathbf{a}^{n+1} = [\mathbf{M}^{-1} \mathbf{N}^T (\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{N} \mathbf{d}^{n+1} + \mathbf{Q} \mathbf{q}^{n+1}, \mathbf{N} \tilde{\mathbf{v}}^{n+1} + \mathbf{Q} \dot{\mathbf{q}}^{n+1}) + \mathbf{F}_{\text{ext}}) - c_m \mathbf{v}^n - c_m \Delta t \mathbf{a}^n / 2] / (1 + c_m \Delta t / 2) \quad (33)$$

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{a}^n + \mathbf{a}^{n+1}) \quad (34)$$

同样地，式(32)中所示 $\tilde{\mathbf{v}}^{n+1}$ 为 \mathbf{v}^{n+1} 的预测值，并被用于计算当前时间步作用于有限元节点处的内力合力。

3 算例

考虑如图 2 所示、受顶部中央宽度为 2.0 m 均布压力载荷作用的地基。如图所示，地基的计算域划分为两部分：执行细尺度分析、尺寸为 6.0 m × 3.0 m 的矩形 DEM 域 (图 2 中的阴影部分)，以及覆盖计算全域的执行粗尺度分析的、包含 190 个节点和 162 个单元的有限元网格域，其中 DEM 域为 18 个单元覆盖。粗尺度分析中 Cosserat 连续体模型材料参数为：弹性模量 $E = 500$ MPa，泊松比 $\nu = 0.2$ ，Cosserat 剪切模量 $G_c = 70$ MPa，内部长度参数 $l_c = 0.05$ m。细尺度分析中颗粒材料参数在表 1 中列出。

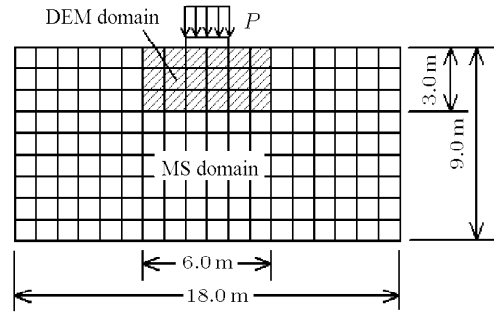


图 2 采用 BSM 分析的地基算例示意图

Fig.2 The soil foundation problem using the BSM

表 1 细尺度分析中的颗粒材料参数

Table 1 Granular material parameters used in fine scale analysis

Parameter	Slected value
particle density (ρ)	2600 N/m ³
stiffness coefficient of normal force (k_N)	2.5×10^8 N/m
stiffness coefficient of sliding force (k_s)	5.0×10^7 N/m
stiffness coefficient of rolling force (k_r)	1.0×10^6 N/m
stiffness coefficient of rolling moment (k_ω)	7.0×10^2 Nm/rad
damping coefficient of normal force (c_N)	0.4 Ns/m
damping coefficient of sliding force (c_s)	0.4 Ns/m
damping coefficient of rolling force (c_r)	0.4 Ns/m
damping coefficient of rolling moment (c_ω)	0.01 Nms/rad
sliding friction force coefficient (μ_s)	0.5
rolling friction force coefficient (μ_r)	0.05
rolling friction moment coefficient (μ_ω)	0.5×10^{-3} m

假定细尺度分析中 DEM 域模型化为如下 3 个不同的颗粒集合体：

(1) 规则排列颗粒集合体 A, 含 2426 个同半径 $r = 0.05\text{m}$ 的圆形颗粒, 其中颗粒间接触法线方向与水平面成 $\pm 45^\circ$ 夹角;

(2) 规则排列颗粒集合体 B, 含 6765 个同半径 $r = 0.03\text{m}$ 的圆形颗粒, 其排列模式与颗粒集合体 A 相同;

(3) 随机排列颗粒集合体 C, 含 6835 个随机半径 $r = 0.02 \sim 0.05\text{m}$ 的圆形颗粒, 其排列模式基于向内堆积法 [25].

载荷通过以垂直向下速率 $v_y = -1.0\text{m/s}$ 的刚性板作用于地基顶部中央, 直至它的垂直向下指定位移达到 $u_y = -60.0\text{mm}$. 图 3 所示的位移 - 承载曲线显示了随着刚性板垂直向下位移作用在颗粒集合体上的载荷变化, 载荷变化经历了从快速到缓和增长的过程, 并且 DEM 区域分别被模型化为规则排列的颗粒集合体 A, B 的两类地基还出现了软化现象. 当顶部承受指定垂直向下位移为 $u_y = -60.0\text{mm}$ 时, 地基的体积应力、有效应力分布由图 4, 图 5 给出, 地基 DEM 区域的名义体积应变和名义有效应变分布由图 6, 图 7 给出. 可以看到颗粒集合体 A, B 中均出现了应变局部化现象, 形成了与水平面成 $\pm 45^\circ$ 分布的“V”型狭长

滑移带; 而在颗粒集合体 C 中, 较大的名义应变集中在出现在顶部载荷作用区域附近, 且没有形成明显的应变局部化带. 从图 3, 图 6 和图 7 可以看到本文的连接尺度方法具有捕捉以软化行为及应变局部化现象为特征的剪切带破坏模式的能力.

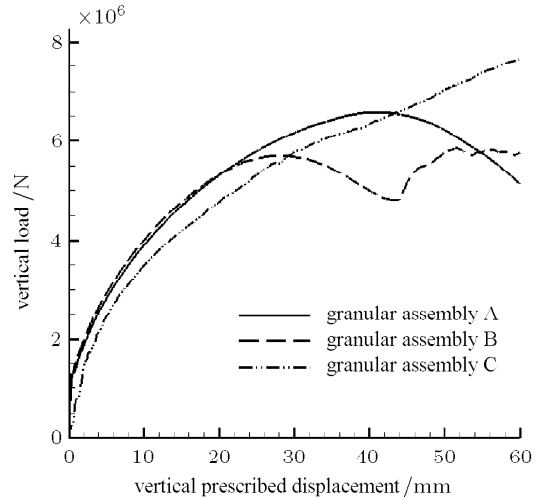


图 3 由不同微结构构成之地基的位移承载曲线

Fig.3 The load-displacement curves for the soil foundations constructed with different microstructures

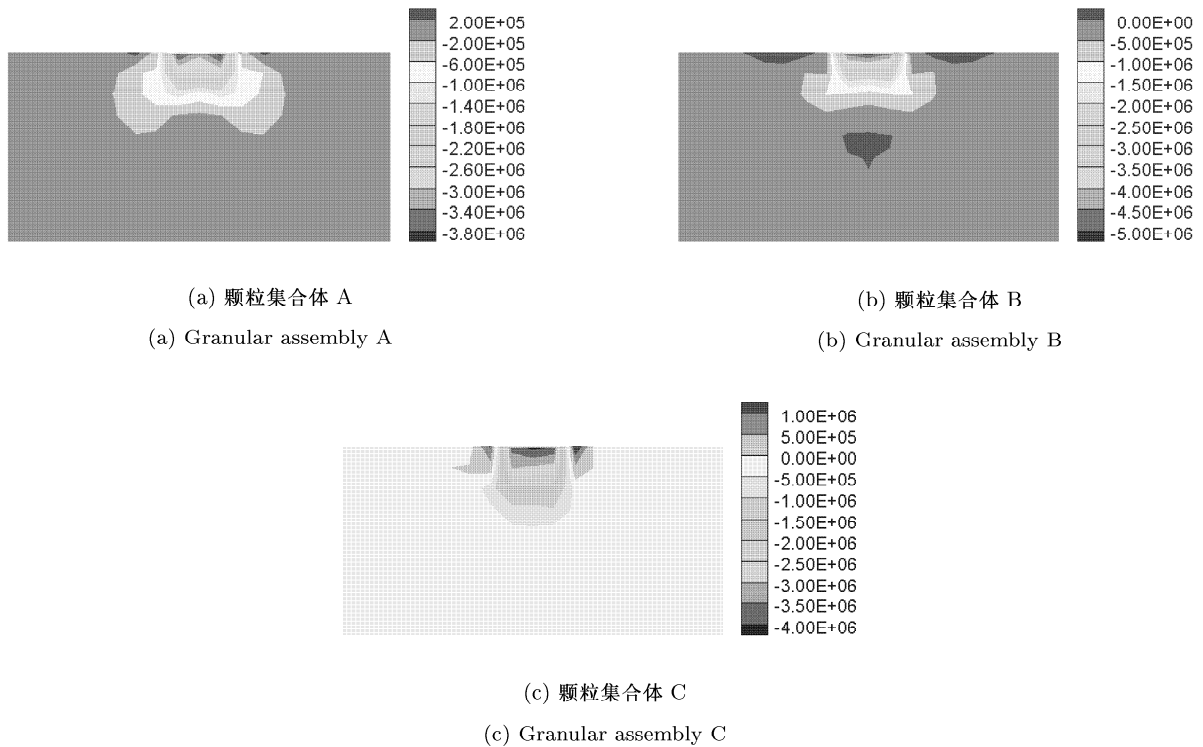


图 4 由不同微结构构成之地基中的体积应力分布

Fig.4 The volumetric stress distributions in the soil foundations constructed with different microstructures

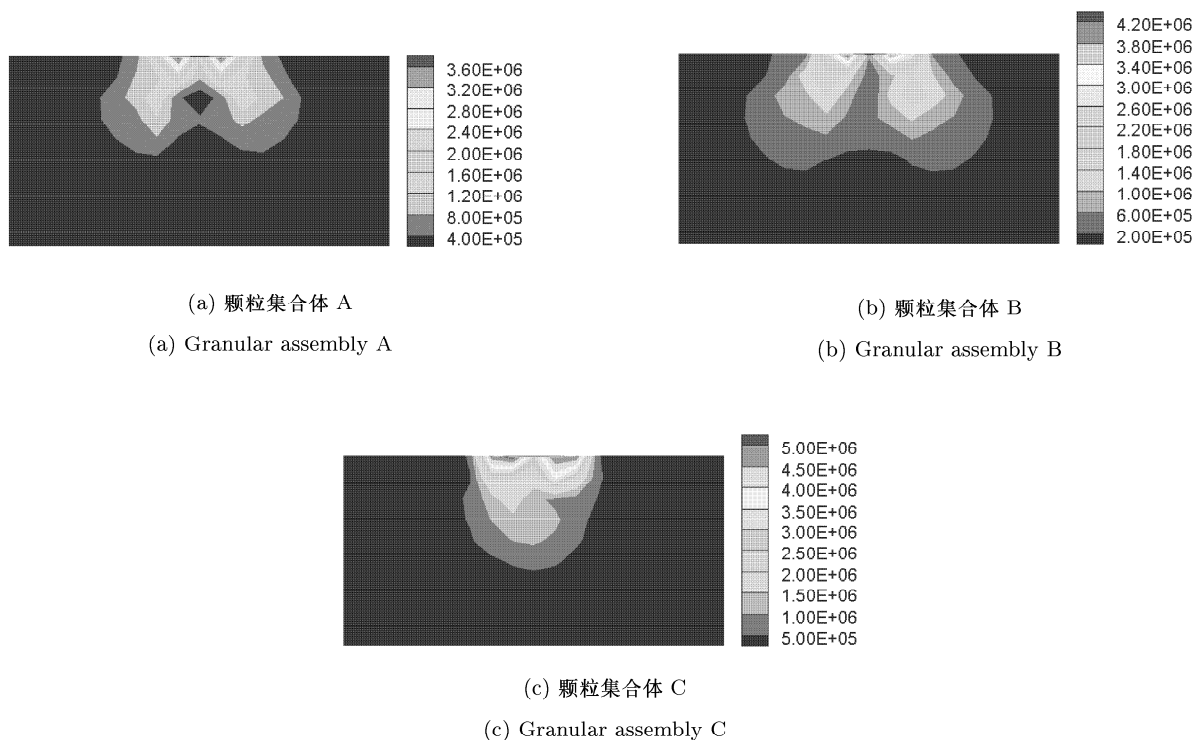


图 5 由不同微结构构成之地基中的有效应力分布

Fig.5 The effective stress distributions in the soil foundations constructed with different microstructures

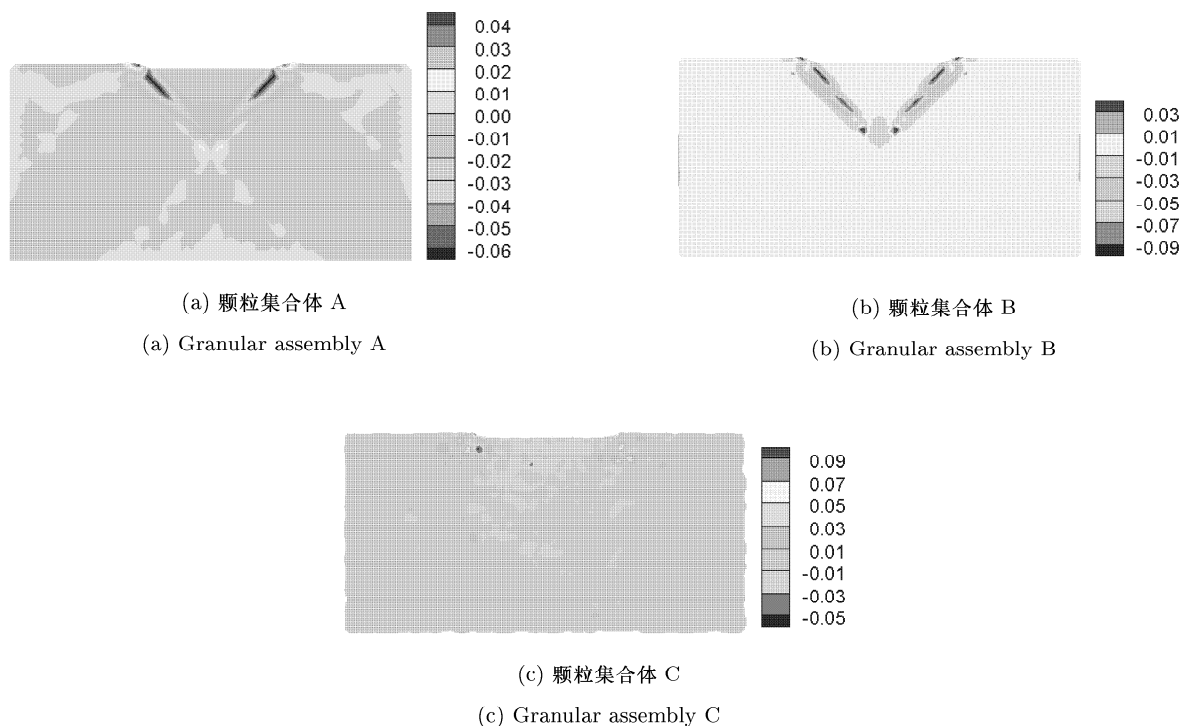


图 6 由不同微结构构成之地基中的名义体积应变分布

Fig.6 The nominal volumetric strain distributions in the soil foundations constructed with different microstructures

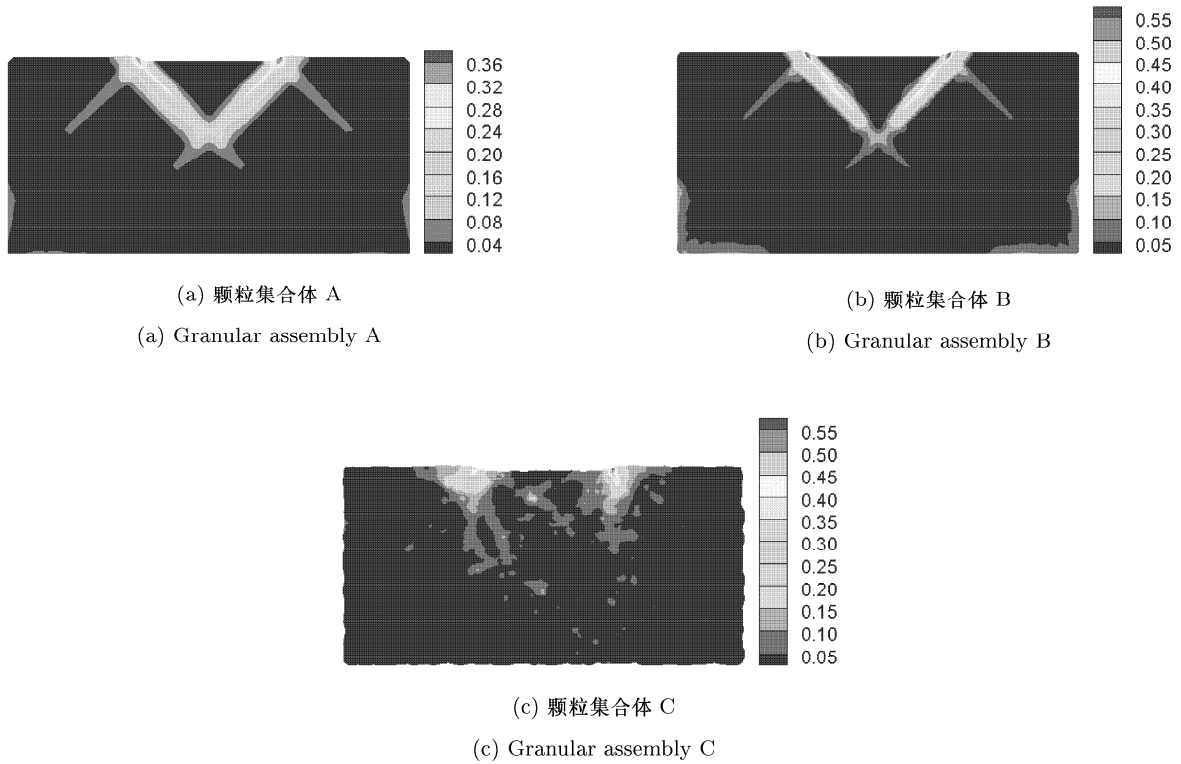


图 7 由不同微结构构成之地基中的名义有效应变分布

Fig.7 The nominal effective strain distributions in the soil foundations constructed with different microstructures

图 8 和图 9 分别给出了在颗粒集合体 A 分别处于硬化、临界和软化状态时其内部的颗粒接触及接触力分布、颗粒速度矢量分布。将失效后即软化态的颗粒集合体 A 的响应与其失效前和失效临界态的响应相对比,图 8 显示在应变局部化带及其周边,以接触状

态表征的颗粒材料微结构具有较大变化,与之伴随的为颗粒间接触力大小的衰减和颗粒接触的最终丧失。图 9 显示在软化阶段后颗粒的速度矢量在应变局部化带处呈现突变性的剧烈变化,表明颗粒材料中剪切带由颗粒间的相互滑移运动形成的机理。

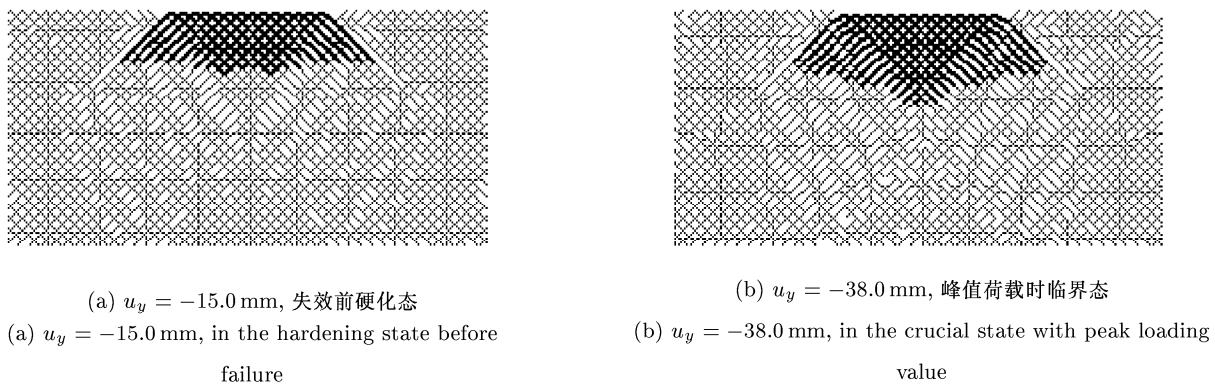
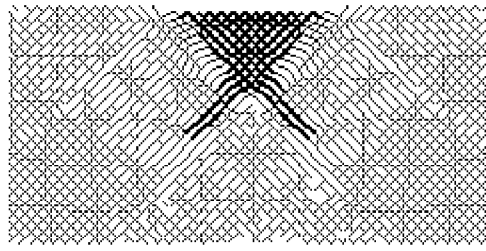


图 8 颗粒集合体 A 所描述微结构之地基在软化前后及临界态的颗粒接触及接触力分布

Fig.8 The distributions of particle contact and contact force in the soil foundation constructed with the microstructure described by granular assembly A

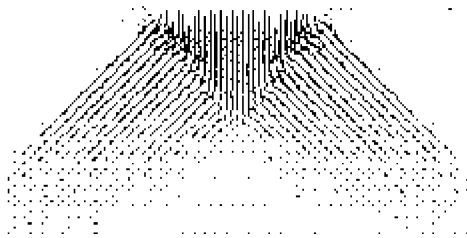


(c) $u_y = -60.0$ mm, 失效后软化态

(c) $u_y = -60.0$ mm, in the softening state (post failure)

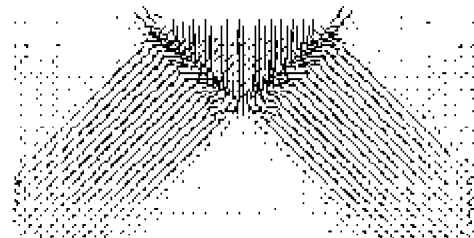
图 8 颗粒集合体 A 所描述微结构之地基在软化前后及临界态的颗粒接触及接触力分布 (续)

Fig.8 The distributions of particle contact and contact force in the soil foundation constructed with the microstructure described by granular assembly A (continued)



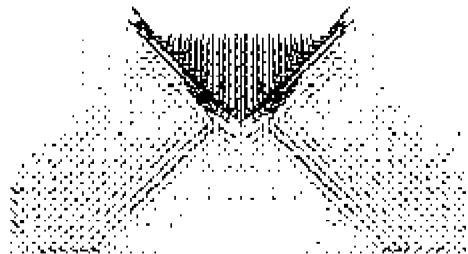
(a) $u_y = -15.0$ mm, 失效前硬化态

(a) $u_y = -15.0$ mm, in the hardening state before failure



(b) $u_y = -38.0$ mm, 峰值荷载时临界态

(b) $u_y = -38.0$ mm, in the crucial state with peak loading value



(c) $u_y = -60.0$ mm, 失效后软化态

(c) $u_y = -60.0$ mm, in the softening state (post failure)

图 9 颗粒集合体 A 所描述微结构之地基在软化前后及临界态的颗粒速度矢量分布

Fig.9 The distributions of velocity vector in the soil foundation constructed with the microstructure described by granular assembly A

图 10 给出了采用宏观 Cosserat 连续体模型和 FEM 数值求解上述地基算例时, 当地基顶部的刚性板垂直向下位移 60.0mm 时地基中的体积应力和有效应力分布. 鉴于 Cosserat 宏观连续体模型计算中假定了材料的各向同性, 而由向内堆积法生成的颗粒集

合体 C 可近似等价各向同性材料^[24], 为验证 BSM, 可把图 6(c) 和图 7(c) 分别与图 10 中的体积应力与有效应力分布进行对比. 可以看到, 图 10 的应力分布与图 6(c) 和图 7(c) 给出的应力分布类似, 表明本文 BSM 在模拟颗粒材料中宏观力学响应的有效性.

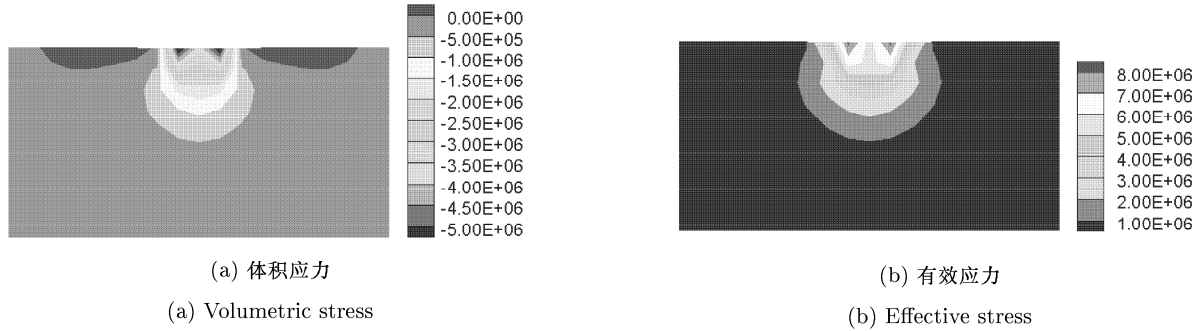


图 10 由 Cosserat 连续体模型的 FEM 计算所得地基应力分布

Fig.10 The stress distributions in the soil foundation calculated with the Cosserat continuum model using FEM

虽然基于弹塑性本构模型的 Cosserat 连续体 FEM 能从宏观角度较为准确地模拟颗粒材料的破坏行为 [6], 但从图 8 和图 9 给出的地基破坏前后的 DEM 域中颗粒接触力和运动速度的演化过程可以看到, BSM 较单一尺度的 Cosserat 连续体模型计算具有能够准确地捕捉细观破坏机理的优势. 因而有望通过采用 BSM 更加深入地探讨和研究工程实际问题中颗粒材料及其结构的宏观破坏失效现象与其微结构中力学响应间的内在联系.

为进一步验证 BSM 的准确性与有效性, 将它与在地基全域均采用细尺度 DEM 的计算结果相比较. 图 11 和图 12 分别给出了两类计算模型所得的位移-承载曲线及名义体积应变、名义有效应变分布对比. 表 2 给出了当地基顶部的垂直指定位移

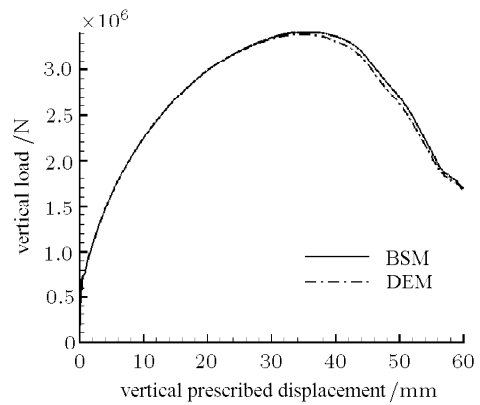


图 11 BSM 和 DEM 计算所得的位移承载曲线比较

Fig.11 Comparisons of the load-displacement curves obtained with the BSM and the DEM

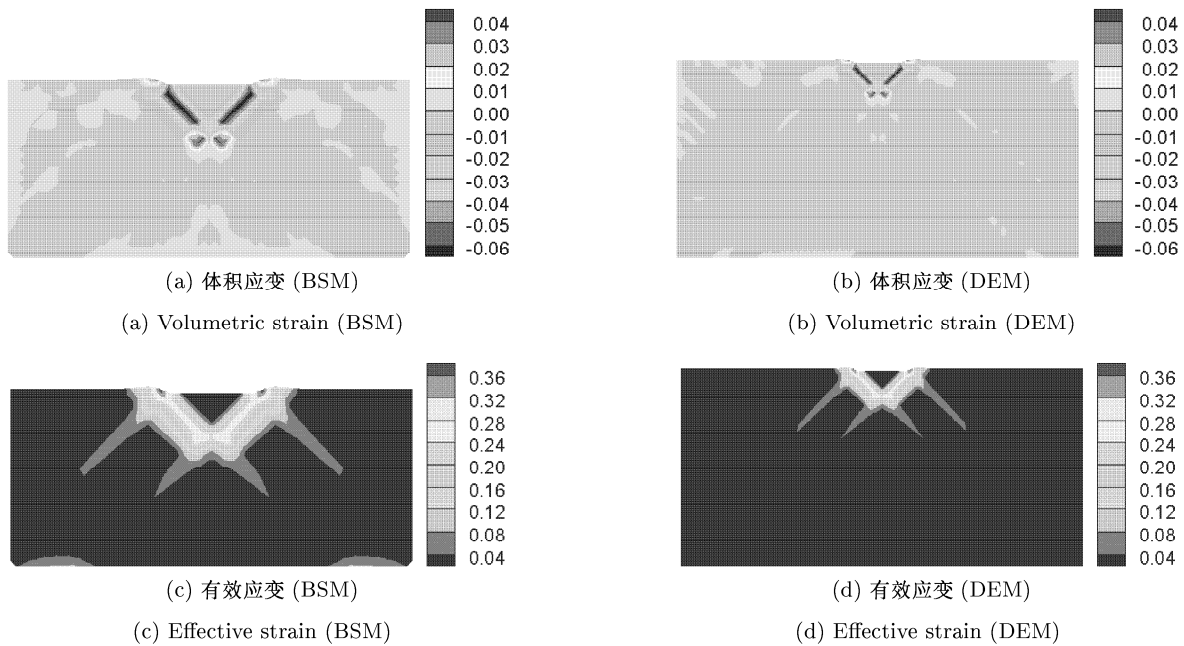


图 12 BSM 和 DEM 计算所得的名义体积应变和有效应变分布比较

Fig.12 Comparisons of the distributions of nominal volumetric and effective strains obtained with the BSM and the DEM

表 2 DEM 和 BSM 计算结果与计算效率比较

Table 2 Comparisons of numerical results and computational efficiencies between the BSM and the DEM

	DEM	BSM	Percentage of difference/%
vertical load/kN	1 674.19	1 691.12	1.01
minimum volumetric stress/MPa	-3.919 3	-4.086 8	4.27
maximum effective stress/MPa	5.919 8	6.219 5	5.06
minimum volumetric strain	-0.065 28	-0.067 37	3.20
maximum effective strain	0.376 5	0.384 5	2.12
total computational time/s	15 139.28	1 578.64	-89.57

$u_y = -60.0$ mm 时两类模型所得结果的数值对比。从图 11, 图 12 及表 2 可以看到这两类模型所得计算结果均十分接近, 从而论证了 BSM 用于模拟颗粒材料结构局部破坏现象的有效性和高精度。而表 2 所显示的计算时间对比表明 BSM 较 DEM 极大地提高了计算效率。

4 结论与讨论

本文将 Wagner 和 Liu^[21-22] 最初以纳米材料为背景而提出的基于分子动力学-经典 Cauchy 连续体细、宏观尺度模型的 BSM 拓展到针对颗粒材料、基于离散颗粒集合体-Cosserat 连续体细、宏观尺度模型并利用离散单元-有限元耦合数值方法的 BSM。

鉴于颗粒材料结构中所发生破坏现象的局部性, 在所发展的连接尺度方法中通常仅需在局部区域内采用能准确模拟颗粒材料细观非连续体响应的颗粒集合体模型和 DEM, 而在全域采用 Cosserat 连续体模型和 FEM。为此, 在本文所发展的 BSM 中提出了处理离散颗粒集合体模型和 Cosserat 连续体模型界面处界面条件的耦合算法。

通过适当定义的连接尺度投影算子, 颗粒材料中粗、细尺度耦合系统多尺度运动方程具有解耦和分别求解的特点, 粗尺度运动方程覆盖以 Cosserat 连续体模型描述的全域, 采用标准的 Cosserat 连续体 FEM 求解; 而细尺度运动方程仅覆盖局部的以离散颗粒集合体模型描述的 DEM 区域, 采用标准的颗粒集合体 DEM 求解。值得强调的是, 由于 BSM 中粗、细尺度运动方程的解耦和分别求解的特点, 因而允许对解耦的离散化宏、细观模型方程分别采用不同的时间步长, 将极大地提高所提出的 BSM 的计算效率, 并已为本文数值例题所验证。

二维地基数值算例结果表明了本文 BSM 具有捕捉以软化行为及应变局部化现象为特征的剪切带

破坏模式的能力和有效性, 以及它较宏观的 Cosserat 连续体模型计算具有能够准确地捕捉细观破坏机理和较细观的 DEM 极大地提高了计算效率的优势。

参 考 文 献

- Oda M, Iwashita K. Mechanics of granular materials. Rotterdam: A.A.Balkema, 1999
- Li X, Chu X. A discrete particle model and numerical modeling of the failure modes of granular materials. *Engng Comput*, 2005, 22: 894-920
- 楚锡华, 李锡夔. 离散颗粒多尺度分级模型与破碎模拟. 大连理工大学学报, 2006, 46(3): 319-326 (Chu Xihua, Li Xikui. Hierarchical multi-scale discrete particle model and crushing simulation. *Journal of Dalian University of Technology*, 2006, 46(3): 319-326 (in Chinese))
- Muhlhaus HB, Vardoulakis I. The thickness of shear bands in granular materials. *Geotechnique*, 1987, 37: 271-283
- de Borst R. Simulation of strain localisation: a reappraisal of the Cosserat continuum. *Engng Comput*, 1991, 8: 317-332
- Li X, Tang H. A consistent return mapping algorithm for pressure-dependent elastoplastic Cosserat continua and modelling of strain localization. *Comput Struct*, 2005, 83: 1-10
- Oda M, Kazama H. Microstructure of shear bands and its relation to the mechanisms of dilatancy and failure of dense granular soils. *Geotechnique*, 1998, 48: 465-481
- Wolf H, Konig D, Triantafyllidis T. Experimental investigation of shear band patterns in granular material. *J Struct Geol*, 2003, 25: 1229-1240
- Zhang J, Xiong C, Li H. Damage and fracture evaluation of granular composite materials by digital image correlation method. *Acta Mechanica Sinica*, 2004, 20: 408-417
- Cundall PA, Strack ODL. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1979, 29: 47-65
- Bardet JP, Proubet J. Adaptive dynamic relaxation for statics of granular materials. *Comput Struct*, 1991, 39: 221-229
- Iwashita K, Oda M. Rolling resistance at contacts in simulation of shear and development by DEM. *J Engng Mech*, 1998, 124: 285-292

- 13 Feng YT, Han K, Owen DRJ. Some computational issues on numerical simulation of particulate systems. In: Proc of the Fifth World Congress on Computational Mechanics, Vienna, Austria, 2002
- 14 Eringen AC. Microcontinuum Field Theories. New York: Springer, 1999
- 15 Bardet JP, Vardoulakis I. The asymmetry of stress in granular media. *Int J Solids Struct*, 2001, 38: 353-367
- 16 Krut NP. Statics and kinematics of discrete Cosserat-type granular materials. *Int J Solids Struct*, 2003, 40: 511-534
- 17 Chang CS, Kuhn MR. On virtual work and stress in granular media. *Int J Solids Struct*, 2005, 42: 3773-3793
- 18 Chang CS, Ma L. Elastic material constants for isotropic granular solids with particle rotation. *Int J Solids Struct*, 1992, 29: 1001-1018
- 19 Chang CS, Shi Q, Liao CL. Elastic constants for granular materials modeled as first-order strain-gradient continua. *Int J Solids Struct*, 2003, 40: 5565-5582
- 20 Walsh SDC, Tordesillas A. A thermomechanical approach to the development of micropolar constitutive models of granular media. *Acta Mech*, 2004, 167: 145-169
- 21 Wagner GJ, Liu WK. Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition. *J Comput Phys*, 2003, 190: 249-274
- 22 Liu WK, Karpov EG, Park HS. Nano Mechanics and Materials: Theory, Multiscale Methods and Applications. Chichester: John Wiley & Sons, 2005
- 23 Hughes TJR, Feijoo GR, Mazzei L, et al. The variational multiscale method—a paradigm for computational mechanics. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 1998, 166: 3-24
- 24 Shenoy VB, Miller R, Tadmor EB, et al. An adaptive finite element approach to atomic-scale mechanics—the quasi-continuum method. *J Mech Phys Solids*, 1999, 47: 611-642
- 25 Bagi K. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. *Granular Matter*, 2005, 7: 31-43

(责任编辑: 刘希国)

A BRIDGING SCALE METHOD FOR MULTI-SCALE ANALYSIS OF GRANULAR MATERIALS¹⁾

Li Xikui²⁾ Wan Ke

(The State Key Laboratory for Structural Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract The bridging scale method (BSM) that couples the discrete particle assembly modeling with discrete element method (DEM) and the Cosserat continuum modeling with finite element method (FEM) in both fine and coarse scales, respectively, is proposed to study the mechanical behaviors of granular materials. The coarse scale domain, modeled with the Cosserat continuum and numerically simulated with the FEM, covers the whole medium concerned; while the fine scale one, modeled with the discrete particle assembly and numerically simulated with the DEM, is limited to a localized region, where the material microstructure, discontinuous deformation behaviors and their evolutions are needed to pay particular attentions. The interfacial condition between the two domains is present and the scheme for its numerical implementation is proposed. By using a proper bridging scale projection operator, two decoupled sets of motion equations of the combined coarse-fine scale system are allowed to solve with two separate solvers and to use distinct time step sizes, which will greatly enhance the computational efficiency of the BSM. The numerical results for a 2D example problem of the soil foundation illustrate the applicability and performance of the proposed method, and its advantages as compared with the FEM based on the Cosserat continuum modeling and the DEM based on the discrete particle assembly modeling.

Key words granular material, bridging scale method, discrete element method, Cosserat continuum, multi-scale

Received 20 May 2009, revised 28 September 2009.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (90715011, 10672033) and the National Key Basic Research and Development Program (973) (2010CB731502).

2) E-mail: xikuili@dlut.edu.cn