

DOI: 10.11779/CJGE201502010

基于热力学和微极理论考虑颗粒破碎的微观力学模型

刘恩龙^{1, 2}, 刘明星^{1, 2}, 陈生水³, 傅中志³

(1. 四川大学水力学与山区河流开发保护国家重点实验室, 四川 成都 610065; 2. 四川大学水利水电学院, 四川 成都 610065;

3. 南京水利科学研究院, 江苏 南京 210029)

摘 要: 颗粒破碎是自然界中常见的物理现象。高应力水平作用下堆石坝料会发生严重的颗粒破碎。基于热力学和微极理论, 建立了考虑颗粒破碎的微观力学模型。为了模拟颗粒体的破碎过程和侧向应力的影响, 把胶结在一起的 3 个等粒径的颗粒体当作颗粒破碎体。通过引入颗粒破碎准则, 并采用均匀化理论, 建立了颗粒尺度的应力-应变关系, 并模拟了加载过程中颗粒破碎发生时的应力和应变。计算结果表明所提出的微观力学模型可以模拟颗粒破碎前的应力逐渐增大和破碎时的应力跌落现象。

关键词: 热力学; 微极理论; 颗粒破碎; 微观力学; 破碎准则

中图分类号: TU43

文献标识码: A

文章编号: 1000-4548(2015)02-0276-08

作者简介: 刘恩龙(1976-), 男, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事岩土本构关系与数值模拟等方面的教学和科研。

E-mail: liuenlong@scu.edu.cn.

Micromechanical modeling of grain breakage based on thermomechanics and micropolar theory

LIU En-long^{1, 2}, LIU Ming-xing^{1, 2}, CHEN Sheng-shui³, FU Zhong-zhi³

(1. State Key Laboratory of Hydraulics and Mountain River Engineering, Chengdu 610065, China; 2. College of Water Resource &

Hydropower, Sichuan University, Chengdu 610065, China; 3. Nanjing Hydraulic Research Institute, Nanjing 210029, China)

Abstract: Grain breakage is a common physical phenomenon in nature. Rockfill materials may break up seriously upon high stress level of loading. Based on the thermomechanics and micropolar theory, a micromechanical model for granular matter is formulated considering the grain breakage. Three grains with the same radius bonded together are taken as an assembly of crushing grain to simulate the grain breaking process with the influence of lateral stress. By introducing the grain breakage criterion and using the homogenization theory, the stress-strain relationship in particle scale is established, and the stress and strain are modeled with breakage occurring in the process of loading. The computed results demonstrate that the proposed micromechanical model can simulate the increase of stress before grain breakage and stress dropping at occurrence of grain breakage.

Key words: thermo-mechanics; micropolar theory; grain breakage; micromechanics; breakage criterion

0 引 言

颗粒破碎是自然界中常见的物理现象。应力水平较高时, 颗粒材料会发生破碎。水电工程、矿山工程、建筑地基基础工程及化学工业等领域都涉及到颗粒破碎现象, 比如高堆石坝料^[1]、岩体爆破^[2]、砂桩施工挤压^[3]、人工胶结材料的冲击破碎^[4]和谷物的存储^[5]等。对于天然材料, 颗粒破碎时大颗粒会破碎成细小颗粒或局部压碎; 而对于由刚性颗粒胶结在一起的人工合成材料, 颗粒破碎会在接触点处发生。当颗粒破碎时, 粒状材料会伴有颗粒的位移和转动。当前, 在考虑颗粒破碎的力学模拟方面主要包括以下 3 类研究方法: ①基于宏观连续介质力学建立的考虑颗粒破碎

的本构模型^[6-9], 主要是修正已有的弹塑性本构模型和从能量耗散角度来考虑颗粒破碎的影响; ②基于颗粒尺度, 建立考虑颗粒滑移和转动的本构模型, 其微观力学参数具有明确的物理意义; ③基于离散单元法^[10-11], 开展单个颗粒集合体和颗粒体试样的破碎过程模拟, 这有助于颗粒破碎机理的认识。

从微观力学角度对颗粒的破碎过程进行数学模拟可为解释宏观本构模型参数的物理意义提供帮助。笔者等已对颗粒破碎-力链屈曲的微观结构力学模型进

基金项目: 国家自然科学基金项目 (91215301)

收稿日期: 2014-05-20

行了初步研究^[12-13], 仅给出了加载过程中的力-位移关系曲线, 没有给出应力-应变关系曲线。为了进行数值计算, 有必要在以上微观结构力学模型的基础上建立其应力-应变关系。本文将从颗粒尺度, 基于热力学和微极理论, 建立考虑颗粒破碎的微观力学模型。对由3个等直径颗粒胶结在一起的颗粒集合体在侧向荷载作用下的破碎过程进行模拟, 并分析了相关参数的影响。

1 微极介质的热力学方程

此处采用微极介质的热力学理论来建立粒状材料考虑颗粒破碎的微观力学模型。经典连续介质力学理论仅考虑单元的位移, 而没有考虑单元的转动。而对于微极介质的每一点, 需要同时考虑位移和转动^[14]。以下仅考虑二维情形的微极介质的变形。对于二维微极介质, 一点的变形用位移矢量 u_i 和转动 ω 来描述, 其变形用微应变 ε_{ij} 和曲率 κ_i 来描述, 可表示为

$$\varepsilon_{ij} = u_{i,j} + e_{ij3}\omega, \quad (1)$$

$$\kappa_i = \omega_i. \quad (2)$$

在微极介质中的一点处存在应力 σ_{ij} 和偶应力 μ_i , 所以该点可以传递力和力矩。作用在单位法向矢量为 n_i 的面力 T_i , 与应力之间的关系为 $T_i = \sigma_{ij}n_j$ 。每单位面积上的力矩 M 与偶应力 μ_i 之间的关系为 $M = \mu_i n_i$ 。二维情形的平衡方程可表示为

$$\sigma_{ij,j} = 0, \quad (3)$$

$$\mu_{i,i} - e_{ij3}\sigma_{ij} = 0. \quad (4)$$

引入自由能函数 $\psi(\varepsilon_{ij}, \kappa_i, \varepsilon_{ij}^p, \kappa_i^p)$ 和耗散函数 D , 基于热力学原理可以得到如下应力和偶应力与自由能和耗散的关系^[14]:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad (5)$$

$$\mu_i = \frac{\partial \psi}{\partial \kappa_i}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon_{ij}^p} \delta \varepsilon_{ij}^p + \frac{\partial \psi}{\partial \kappa_i^p} \delta \kappa_i^p + D = 0, \quad (7)$$

式中, ε_{ij}^p 是塑性应变, κ_i^p 是塑性曲率。热力学第二定律要求塑性变形发生时耗散必须大于零。

对于图1所示的颗粒组成的 Voronoi 胞元, 考虑到塑性变形时有如下的关系:

$$\Delta u^{\text{en}} = 2R(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^p)n_i n_j, \quad (8)$$

$$\Delta u^{\text{et}} = 2R(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^p)t_i n_j + 2R^2(\kappa_i - \kappa_i^p)n_i, \quad (9)$$

$$\Delta \omega^e = 2R(\kappa_i - \kappa_i^p)n_i, \quad (10)$$

式中, Δu^{en} 是法向弹性接触位移, Δu^{et} 是切向弹性接触位移, $\Delta \omega^e$ 是弹性转角, t_i 是接触切向矢量。并引

入如下内变量: $\varepsilon_{ij}^{\text{pn}}$ 是法向塑性应变, $\varepsilon_{ij}^{\text{pt}}$ 是切向塑性应变和 κ_i^p 是塑性曲率^[15]。

由式(1)~(9)可以得到应力和偶应力的表达式:

$$\sigma_{ij} = \frac{2R^2}{V} \left\{ k^n (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{\text{pn}}) \int_{\Omega} n_i n_j n_k n_l \Phi(n) dn + k^t (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{\text{pt}}) \int_{\Omega} t_i n_j t_k n_l \Phi(n) dn \right\}, \quad (11)$$

$$\mu_i = \frac{2R^4}{V} (k^t + k^r) (\kappa_j - \kappa_j^p) \int_{\Omega} n_i n_j \Phi(n) dn, \quad (12)$$

式中, V 是 Voronoi 多边形的面积, $\Phi(n)$ 是接触法向为 n 的接触密度分布函数, k^n , k^t 和 k^r 分别是与法向力、切向力和接触距相关的弹性系数。

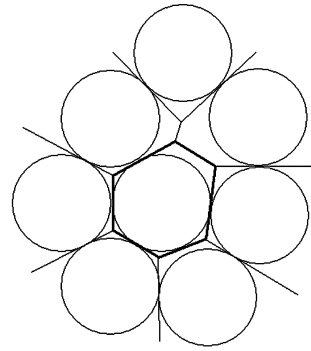


图1 离散颗粒体 Voronoi 胞元

Fig. 1 A Voronoi tessellation of discrete assembly

2 颗粒破碎的微观力学模型

2.1 模型假定

为了模拟胶结在一起的颗粒集合体的破碎过程, 采用图2所示的颗粒集合体模型, 其由6个等直径的可变形颗粒组成。颗粒2, 3和4胶结在一起形成大颗粒。为了考虑周围颗粒的侧向作用, 颗粒5和6分别与颗粒3和2接触, 且颗粒1与颗粒2, 3在下部接触。加载初期(或施加竖向位移 Δ), 颗粒2, 3和4胶结在一起; 随着荷载(或竖向位移 Δ)的增大, 颗粒2, 3和4接触点的力和矩也逐渐增加, 当它们接触点的力或矩满足破碎准则时在接触点就发生破碎, 此时大颗粒就破碎成3个小颗粒(颗粒2, 3和4), 且颗粒2, 3和4的接触点破碎后就转化为新的接触。本文采用该方法来模拟颗粒集合体的破碎过程。

采用图2的颗粒集合体模型来建立颗粒破碎的微观力学模型时, 假定颗粒5和6仅对颗粒3和2提供水平支撑作用(即仅有水平力 F^L 作用在接触点上), 且在竖直方向颗粒5的中心位置与颗粒3的中心位置相同, 颗粒6的中心位置与颗粒2的中心位置相同。边界条件如下: ①颗粒1的中心固定; ②颗粒4的中心水平方向固定; ③所有的颗粒都可以转动(侧限颗

粒 5 和 6 不转动)。

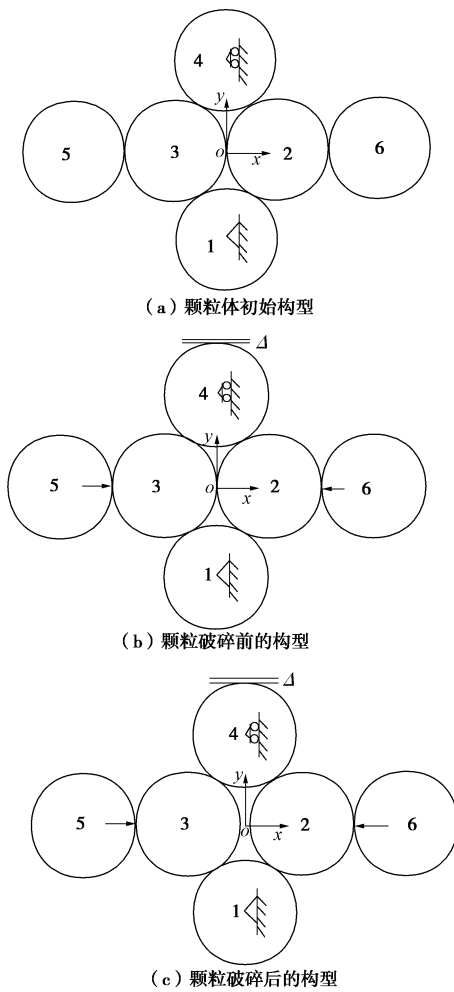


图 2 颗粒集合体模型

Fig. 2 Computational model of particle assemblies

2.2 接触模型

基于颗粒破碎的 DEM 模拟和可破碎颗粒材料的物理试验^[4, 10], 假定在颗粒之间的接触点处存在接触力和力矩, 并作如下假定: ①在大颗粒 (包含颗粒 2、3 和 4) 破碎之前, 颗粒 2、3 和 4 之间的接触关系是相同的; ②在大颗粒 (包含颗粒 2、3 和 4) 破碎之后, 所有颗粒之间的接触关系是相同的; ③颗粒 1 与颗粒 2、3 的接触与大颗粒破碎之后的接触关系相同。

(1) 颗粒 2、3 和 4 之间的接触力

颗粒破碎前, 颗粒 2、3 和 4 之间的接触力与位移的关系为弹性的。当接触力增大到某一值时, 颗粒间的接触就沿法向或切向破坏而转化为新的接触。

颗粒破碎前的法向力 F^n 和切向力 F^s 表示如下:

$$\left. \begin{aligned} F^n &= k_1^n (\Delta u)^n \\ F^s &= k_1^s (\Delta u)^s \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

式中, k_1^n 和 k_1^s 分别是法向和切向的弹性系数, $(\Delta u)^n$ 和 $(\Delta u)^s$ 分别是接触点的相对法向和切向位移。

破碎准则如下: ①当 $F^n = C_N$ 时, 颗粒在接触处

沿法向破碎, 其中 C_N 是抗拉强度; ②当 $F^s = C_s$ 时, 颗粒间的接触沿切向破碎, 其中 C_s 是脆性抗剪强度。

当破碎发生后颗粒之间的接触力如下:

$$F^n = k_2^n (\Delta u)^n, \quad (14)$$

$$F^s = \begin{cases} k_2^s (\Delta u)^s & (k_2^s (\Delta u)^s < \mu^s F^n) \\ \mu^s F^n & (k_2^s (\Delta u)^s \geq \mu^s F^n) \end{cases}, \quad (15)$$

式中, k_2^n 和 k_2^s 分别是法向和切向的弹性系数, μ^s 是摩擦系数。

(2) 颗粒 2、3 和 4 之间的力矩

颗粒 2、和 4 之间接触点的力矩所服从的物理规律与接触力的类似。颗粒破碎前随着接触点的相对转动角的增大而线性增加。当接触力矩达到某一值时颗粒间的接触就破坏而转化为新的接触。颗粒破碎前的接触矩 M 为

$$M = k_1^m R^2 (\Delta \omega), \quad (16)$$

式中, k_1^m 是弹簧转动系数, $\Delta \omega$ 是接触点的相对转角。

破碎准则如下: 当 $M = M_c$ 时, 颗粒在接触处就破碎, 其中 M_c 是矩强度。

颗粒破碎之后的接触矩和转角之间满足如下关系:

$$M = \begin{cases} k_2^m R^2 (\Delta \omega) & (k_2^m R^2 (\Delta \omega) < \mu^m R F^n) \\ \mu^m R F^n & (k_2^m R^2 (\Delta \omega) \geq \mu^m R F^n) \end{cases}, \quad (17)$$

式中, k_2^m 是弹性转动系数, μ^m 是矩摩擦系数。

(3) 颗粒 5 和 6 提供的作用力

颗粒 5 和 6 作用在颗粒 2 和 3 上的接触力用 F^L 表示, 它是侧向颗粒所提供的总的侧向作用, 作用在水平方向 (即 x_1 方向), 且满足如下关系:

$$F^L = \begin{cases} k^L (\Delta u)^L & (k^L (\Delta u)^L < R \mu^L \sigma^L) \\ R \mu^L \sigma^L & (k^L (\Delta u)^L \geq R \mu^L \sigma^L) \end{cases}, \quad (18)$$

式中, k^L 是侧向弹簧系数, μ^L 是侧向摩擦系数, σ^L 是侧向颗粒可以提供的最大应力。

(4) 颗粒 1 与颗粒 2、3 之间的接触力和矩

颗粒 1 与颗粒 2 和 3 的接触关系与颗粒破碎后颗粒 2、3 和 4 之间的接触关系相同, 即颗粒 1 与颗粒 2 和 3 的接触点处的法向力 - 位移关系和切向力 - 位移关系由式 (14)、(15) 给出, 接触矩 - 转角关系由式 (17) 给出。

2.3 颗粒之间的相对位移

对于图 2 所示的颗粒集合体, 需要计算颗粒接触点的相对位移以便于建立颗粒破碎时的微观力学模型。图 3 为半径相同的颗粒 a、b 之间的接触示意图, 在接触点颗粒 a 相对于颗粒 b 的相对位移为

$$\Delta u_i = u_i^a - u_i^b + e_{ij3} n_j R (\omega_a + \omega_b), \quad (19)$$

式中, u_i 是颗粒中心点的位移, ω_a 和 ω_b 是颗粒 a 和 b 的转角, n_i 是从颗粒 b 中心指向接触点的单位矢量 n 的分量, e_{ij3} 的值如下: $i=x, j=y$ 时, $e_{ij3}=1$; $i=y, j$

$=x$ 时, $e_{ij3}=-1$; $i=x, j=x$ 时, $e_{ij3}=0$; $i=y, j=y$ 时, $e_{ij3}=0$ 。因此, 可以得到颗粒 a 和 b 在接触点沿法向 (n 方向) 和切向 (t 方向) 的分量分别为

$$(\Delta u)^n = \Delta u_i n_i = (u_i^a - u_i^b) n_i, \quad (20)$$

和

$$(\Delta u)^s = \Delta u_i t_i = [u_i^a - u_i^b + e_{ij3} n_j R(\omega_a + \omega_b)] t_i. \quad (21)$$

颗粒 a 和 b 在接触点处的相对转动为

$$\Delta \omega = \omega_a - \omega_b. \quad (22)$$

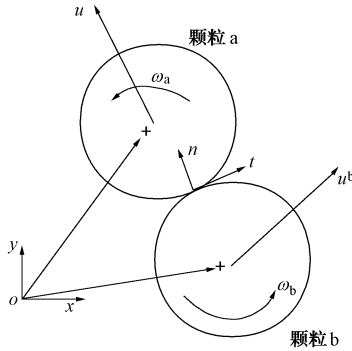


图3 任意颗粒 a 和 b 的接触

Fig. 3 Contact between two arbitrary particles "a" and "b"

2.4 颗粒破碎的微观力学分析

采用图2所示的微观力学模型时, 假定小变形和小转动, 且仅考虑在颗粒4的顶部沿着竖直方向 (y 方向) 向下施加位移 Δ 。随着 Δ 的增加, 颗粒接触点的力和矩都相应增加, 当由颗粒2, 3和4组成的大颗粒内部的接触点的力或矩达到破碎准则时, 大颗粒就破碎成小颗粒2, 3和4。破碎过程中颗粒2, 3和4之间的接触转变为新的接触, 且颗粒发生位移来承担外部荷载。以下把加载过程分为二个阶段, 即破碎前的加载阶段和破碎加载阶段。

(1) 破碎前的加载阶段

该阶段颗粒体处于弹性阶段。由图2颗粒集合体的几何形状 (关于 y 轴对称) 和边界条件可知, 在加载过程中颗粒都不会发生转动, 所以有 $\omega_1 = \omega_4 = \omega_2 = \omega_3 = 0$, 并且满足如下条件:

$$\left. \begin{aligned} u_x^{(2)} &= -u_x^{(3)} = u, \\ u_y^{(2)} &= u_y^{(3)} = v, \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

式中, $u_x^{(2)}$ 和 $u_y^{(2)}$ 为颗粒2在 x 和 y 方向的位移, $u_x^{(3)}$ 和 $u_y^{(3)}$ 为颗粒3在 x 和 y 方向的位移, u 和 v 分别为 x 方向和 y 方向位移。

根据热力学第一和第二定律, 可得到^[12]

$$dW = d\psi + D. \quad (24)$$

式中 D 是能量耗散, 在该阶段为0, dW 为外力做的功, 可表示为

$$dW = F \cdot d\Delta, \quad (25)$$

其中, Δ 为 y 方向施加的位移, F 为相应外力, $d\psi$ 为系统的自由能增量,

$$d\psi = d\psi^{(4-3)} + d\psi^{(4-2)} + d\psi^{(3-2)} + d\psi^{(3-1)} + d\psi^{(2-1)} + d\psi^{(5-3)} + d\psi^{(6-2)}, \quad (26)$$

式中, $d\psi^{(i-j)}$ 为颗粒 i, j 之间接触点所存储的自由能增量,

$$d\psi^{(4-3)} = \left[\frac{1}{4} k_1^n (u + \sqrt{3}\Delta - \sqrt{3}v) + \frac{1}{4} k_1^s (3u - \sqrt{3}\Delta + \sqrt{3}v) \right] du + \left[\frac{1}{4} k_1^n (\sqrt{3}u + 3\Delta - 3v) - \frac{1}{4} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v) \right] d\Delta + \left[\frac{1}{4} k_1^n (-\sqrt{3}u - 3\Delta + 3v) + \frac{1}{4} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v) \right] dv, \quad (27)$$

$$d\psi^{(4-2)} = \left[\frac{1}{4} k_1^n (u + \sqrt{3}\Delta - \sqrt{3}v) + \frac{1}{4} k_1^s (3u - \sqrt{3}\Delta + \sqrt{3}v) \right] du + \left[\frac{1}{4} k_1^n (\sqrt{3}u + 3\Delta - 3v) - \frac{1}{4} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v) \right] d\Delta + \left[\frac{1}{4} k_1^n (-\sqrt{3}u - 3\Delta + 3v) + \frac{1}{4} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v) \right] dv, \quad (28)$$

$$d\psi^{(3-2)} = 4k_1^n u du, \quad (29)$$

$$d\psi^{(3-1)} = \left[\frac{1}{4} k_2^n (u + \sqrt{3}v) + \frac{1}{4} k_2^s (3u - \sqrt{3}v) \right] du + \left\{ \left[\frac{1}{4} k_2^n (\sqrt{3}u + 3v) - \frac{1}{4} k_2^s (\sqrt{3}u - v) \right] \right\} dv, \quad (30)$$

$$d\psi^{(2-1)} = \left[\frac{1}{4} k_2^n (u + \sqrt{3}v) + \frac{1}{4} k_2^s (3u - \sqrt{3}v) \right] du + \left\{ \left[\frac{1}{4} k_2^n (\sqrt{3}u + 3v) - \frac{1}{4} k_2^s (\sqrt{3}u - v) \right] \right\} dv, \quad (31)$$

$$d\psi^{(5-3)} = d\psi^{(6-2)} = k^L u du. \quad (32)$$

把式(26) ~ (32) 和式(25) 代入式(24) 得

$$F \cdot d\Delta = \left\{ \frac{1}{2} k_1^n (u + \sqrt{3}\Delta - \sqrt{3}v) + \frac{1}{2} k_1^s (3u - \sqrt{3}\Delta + \sqrt{3}v) + 4k_1^n u + \frac{1}{2} k_2^n (u + \sqrt{3}v) + \frac{1}{2} k_2^s (3u - \sqrt{3}v) + 2k^L u \right\} du + \left\{ \frac{1}{2} k_1^n (-\sqrt{3}u - 3\Delta + 3v) + \frac{1}{2} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v) + \frac{1}{2} k_2^n (\sqrt{3}u + 3v) - \frac{1}{2} k_2^s (\sqrt{3}u - v) \right\} dv + \left[\frac{1}{2} k_1^n (\sqrt{3}u + 3\Delta - 3v) - \frac{1}{2} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v) \right] d\Delta. \quad (33)$$

对于任意的 du , dv 和 $d\Delta$, 等式两边的系数项相等, 得到以 u , v 和 F 为未知量的方程组, 求解后得到力 F 和位移 u , v 的表达式如下:

$$F = \frac{1}{2} k_1^n (\sqrt{3}u + 3\Delta - 3v) - \frac{1}{2} k_1^s (\sqrt{3}u - \Delta + v), \quad (34)$$

$$\left. \begin{aligned} u &= K_1^e \Delta, \\ v &= K_2^e \Delta, \end{aligned} \right\} \quad (35)$$

式中, $K_1^e = [\sqrt{3}(k_1^s - k_1^n)(3k_1^n + k_1^s + 3k_2^n + k_2^s) - (3k_1^n + k_1^s)(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)] / [(9k_1^n + 3k_1^s + k_2^n + 3k_2^s + 4k^L)(3k_1^n + k_1^s + 3k_2^n + k_2^s) - 3(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)]$ 和 $K_2^e = [(9k_1^n + 3k_1^s + k_2^n + 3k_2^s + 4k^L)(3k_1^n + k_1^s) - 3(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)] / [(9k_1^n + 3k_1^s + k_2^n + 3k_2^s + 4k^L)(3k_1^n + k_1^s + 3k_2^n + k_2^s) - 3(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)(k_1^s - k_1^n + k_2^n - k_2^s)]$ 。

(2) 破碎加载阶段

随着 Δ 的逐渐增加, 当颗粒 2, 3 和 4 之间接触点满足破碎准则时, 颗粒在接触点处就发生破碎。由破碎前的加载阶段的计算结果可知, 颗粒 2 和 3 之间接触点仅产生法向拉应力, 而颗粒 4 与 3、颗粒 4 与 2 之间产生法向压应力, 且存在大小相等的切向力。因此, 假定颗粒 4, 3 和 2 在接触点处同时破碎, 且颗粒破碎发生时的量用下标 b 来表示。颗粒破碎发生时, 对于颗粒 2 和 3 在接触点的法向力达到抗拉强度 C_N , 可以得到

$$C_N = k_1^n (\Delta u)_b^{(3-2)n} = 2k_1^n u_b = 2k_1^n K_1^e \Delta_b, \quad (36)$$

式中, $(\Delta u)_b^{(3-2)n}$ 为破碎时颗粒 3 与 2 接触点的法向位移; 对于颗粒 4 和 3 在接触点的切向力达到脆性抗剪强度 C_s , 可以得到

$$C_s = k_1^s [(\Delta u)_b^{(4-3)s}] = k_1^s \left[\frac{\sqrt{3}}{2} u_b - \frac{1}{2} (\Delta_b - v_b) \right] = k_1^s \left[\frac{\sqrt{3}}{2} K_1^e - \frac{1}{2} (1 - K_2^e) \right] \Delta_b, \quad (37)$$

式中, $(\Delta u)_b^{(3-2)s}$ 为破碎时颗粒 4 和 3 接触点的切向位移。对于颗粒 4 和 2, 同样得到上述关系。

考虑到颗粒体的几何构型、边界条件和加载条件, 在颗粒破碎发生时做如下假定: ①颗粒破碎的时间非常短; ②竖直方向的位移保持不变; ③颗粒 2 不转动, 颗粒 1, 3 和 4 发生转动。颗粒破碎时, 颗粒 4, 3 和 2 之间的接触关系破碎后转化为新的接触关系。当破碎发生时, 存储在颗粒 2, 3 和 4 接触点的自由能会转化为两部分, 一部分是存储于颗粒 2, 3 和 4 接触点的法向和切向自由能, 令一部分转化为颗粒 1, 3 和 4 接触点的转动自由能。在破碎过程中, 自由能假定为常数。这一假定也被用于考虑材料的损伤、破碎和断裂^[16]。假定颗粒 4 和 1 顺时针转动 θ , 颗粒 3 逆时针转动 θ , 可以得到

$$\begin{cases} (\Delta\omega)_{4-3} = \omega_4 - \omega_3 = -2\theta, \\ (\Delta\omega)_{3-1} = \omega_3 - \omega_1 = 2\theta. \end{cases} \quad (38)$$

可知, 颗粒破碎发生前存储于颗粒接触点的自由

能表示为

$$\begin{aligned} \psi^{\text{before}} = & k_1^n \left[\frac{1}{2} u_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} (\Delta - u_2) \right]^2 + k_1^s \left[\frac{\sqrt{3}}{2} u_1 - \frac{1}{2} (\Delta - u_2) \right]^2 + \\ & 2k_1^n (u_1)^2 + k^L (u_1)^2 + k_2^n \left(\frac{1}{2} u_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} u_2 \right)^2 + \\ & k_2^s \left(\frac{\sqrt{3}}{2} u_1 - \frac{1}{2} u_2 \right)^2. \end{aligned} \quad (39)$$

颗粒破碎发生后存储于颗粒接触点的自由能表示为

$$\begin{aligned} \psi^{\text{after}} = & k_2^n \left(\frac{1}{2} u_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} (\Delta - u_2) \right)^2 + k_2^s \left(\frac{\sqrt{3}}{2} u_1 - \frac{1}{2} (\Delta - u_2) \right)^2 + \\ & 2k_2^n (u_1)^2 + k^L (u_1)^2 + k_2^n \left(\frac{1}{2} u_1 + \frac{\sqrt{3}}{2} u_2 \right)^2 + \\ & k_2^s \left(\frac{\sqrt{3}}{2} u_1 - \frac{1}{2} u_2 \right)^2 + 4k_2^m R^2 \theta^2. \end{aligned} \quad (40)$$

由 $\psi^{\text{before}} = \psi^{\text{after}}$ 可以得到

$$\theta_b = \frac{1}{2R} \sqrt{\frac{(k_1^n - k_2^n) \left(\frac{1}{2} K_1^e + \frac{\sqrt{3}}{2} (1 - K_2^e) \right)^2 + (k_1^s - k_2^s) \left(\frac{\sqrt{3}}{2} K_1^e - \frac{1}{2} (1 - K_2^e) \right)^2}{k_2^m}} \Delta_b. \quad (41)$$

因此, 当得到颗粒破碎发生时颗粒集合体系统的转动为式 (41), 位移和竖向力分别为

$$\begin{cases} u_1 = K_1^e \Delta_b, \\ u_2 = K_2^e \Delta_b, \end{cases} \quad (42)$$

$$F = \frac{1}{2} \left[k_2^n (\sqrt{3} K_1^e + 3 - 3 K_2^e) - k_2^s (\sqrt{3} K_1^e - 1 + K_2^e) \right] \Delta_b. \quad (43)$$

3 微观应力 - 应变关系

此处建立颗粒集合体的基于颗粒尺度的本构模型。对于图 4 所示的颗粒系统, 在主应变空间内定义应变和曲率。

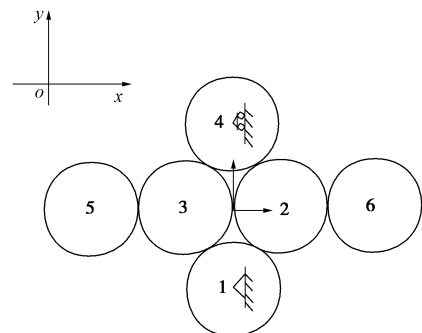


图 4 颗粒系统的构型

Fig. 4 Configuration of particle system

图 4 中通过颗粒 3 的中心的连续介质单元的应变可以表示为

$$\varepsilon_1(\Delta) = \frac{u^{(3)}(\Delta) - R - (-R)}{2R} = \frac{u_x^{(3)}(\Delta)}{2R}, \quad (44)$$

$$\varepsilon_2(\Delta) = \frac{v^{(3)}(\Delta)}{2R}, \quad (45)$$

式中, 1 沿 x 方向, 2 沿 y 方向, R 为颗粒半径。

曲率度量了转动的梯度 ($\kappa_i = \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \approx \frac{\delta \omega}{\delta x_i}$), 定义

图 4 中的曲率为

$$\left. \begin{aligned} \kappa_1(\Delta) &= \frac{\omega_3(\Delta)}{R - u_1^3}, \\ \kappa_2(\Delta) &= \frac{\omega_1(\Delta) - \omega_4(\Delta)}{2\sqrt{3}R - \Delta}. \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

定义 θ 度量与颗粒 3 的接触角度 (颗粒与颗粒的中心的连线与 y 轴所成的夹角), 则有接触的法向单位矢量为 $n_i = (-\sin \theta, \cos \theta)$ 和接触的切向单位矢量为 $t_i = (\cos \theta, \sin \theta)$ 。所以式 (8) ~ (10) 可以简化为

$$\begin{aligned} \Delta u^{\text{en}} &= 2R(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{\text{pn}})n_i n_j \\ &= 2R^2 \{(\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{\text{pn}})(\sin \theta)^2 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_2^{\text{pn}})(\cos \theta)\}, \quad (47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta u^{\text{et}} &= 2R(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^{\text{pt}})t_i n_j + 2R^2(\kappa_i - \kappa_i^{\text{p}})n_i \\ &= R \{-(\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{\text{pt}})\sin 2\theta + (\varepsilon_2 - \varepsilon_2^{\text{pt}})\sin 2\theta\} + \\ &\quad 2R^2 \{-(\kappa_1 - \kappa_1^{\text{p}})\sin \theta + (\kappa_2 - \kappa_2^{\text{p}})\cos \theta\}, \quad (48) \end{aligned}$$

$$\Delta \omega^{\text{e}} = 2R \{-(\kappa_1 - \kappa_1^{\text{p}})\sin \theta + (\kappa_2 - \kappa_2^{\text{p}})\cos \theta\}. \quad (49)$$

对于式 (47), 考虑侧向颗粒 5 与颗粒 3 的作用。当 $\theta = \pi/2$ 时, 由式 (47) 得到

$$\varepsilon_1^{\text{pn}} = \varepsilon_1(\Delta) - \frac{1}{2R} \frac{f^{\text{L}}(\Delta)}{k^{\text{L}}}. \quad (50)$$

考虑颗粒 4 与颗粒 3 的作用, 当 $\theta = \theta_{4-3n} = -\arcsin \frac{R - u_1^3}{2R}$ 时, 由式 (47) 得到

$$\varepsilon_2^{\text{pn}} = \varepsilon_2 - \frac{1}{(\cos \theta_{4-3n})^2} \left\{ \frac{(\Delta u^{\text{en}})_{4-3}}{2R} - (\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{\text{pn}})(\sin \theta_{4-3n})^2 \right\}. \quad (51)$$

对于式 (49), 考虑颗粒 4 的转动, 当 $\theta = \theta_{4-3n} = -\arcsin \frac{R - u_1^3}{2R}$ 时, 由式 (49) 得到

$$(\Delta \omega^{\text{e}})_4 = 2R \{-(\kappa_1 - \kappa_1^{\text{p}})\sin \theta_{4-3n} + (\kappa_2 - \kappa_2^{\text{p}})\cos \theta_{4-3n}\}. \quad (52)$$

考虑颗粒 1 的转动, 当 $\theta = \theta_{1-3n} = \pi + \arcsin \frac{R - u_1^3}{2R}$ 时, 由式 (49) 得到

$$(\Delta \omega^{\text{e}})_1 = 2R \{-(\kappa_1 - \kappa_1^{\text{p}})\sin \theta_{1-3n} + (\kappa_2 - \kappa_2^{\text{p}})\cos \theta_{1-3n}\}. \quad (53)$$

对于式 (48), 考虑颗粒 4 对颗粒 3 的作用, 当 $\theta = \theta_{4-3n} = -\arcsin \frac{R - u_1^3}{2R}$ 时, 由式 (48) 得到

$$\begin{aligned} (\Delta u^{\text{et}})_{4-3} &= R \{-(\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{\text{pt}}) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_2^{\text{pt}})\} \sin 2\theta_{4-3n} + \\ &\quad 2R^2 \{-(\kappa_1 - \kappa_1^{\text{p}})\sin \theta_{4-3n} + (\kappa_2 - \kappa_2^{\text{p}})\cos \theta_{4-3n}\}. \quad (54) \end{aligned}$$

考虑颗粒 1 对颗粒 3 的作用, 当

$$\begin{aligned} \theta = \theta_{1-3n} = \pi + \arcsin \frac{R - u_1^3}{2R} \text{ 时, 由式 (48) 得到} \\ (\Delta u^{\text{et}})_{1-3} &= R \{-(\varepsilon_1 - \varepsilon_1^{\text{pt}}) + (\varepsilon_2 - \varepsilon_2^{\text{pt}})\} \sin 2\theta_{1-3n} + \\ &\quad 2R^2 \{-(\kappa_1 - \kappa_1^{\text{p}})\sin \theta_{1-3n} + (\kappa_2 - \kappa_2^{\text{p}})\cos \theta_{1-3n}\}. \quad (55) \end{aligned}$$

由式 (54)、(55) 可以得到 $\varepsilon_1^{\text{pt}}$ 和 $\varepsilon_2^{\text{pt}}$ 。

以上得到内变量的演化方程, 进行积分求解就可以得到应力 - 应变关系的表达式。当颗粒之间没有塑性变形时, 可以适当简化。假定接触密度分布不考虑各向异性的影响, 则 $\Phi(n) = N/(2\pi)$, 其中, N 是每个颗粒的接触数目。由以上可以得到本构方程为

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \frac{NR^2}{4V} \{k^n (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{\text{pn}}) + \\ &\quad k^{\text{t}} (3\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{il}\delta_{jk})(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^{\text{pt}})\}, \quad (56) \end{aligned}$$

$$\mu_i = \frac{NR^4}{V} (k^{\text{t}} + k^{\text{r}})(\kappa_j - \kappa_j^{\text{p}}). \quad (57)$$

4 模拟结果及分析

定义 $\sigma_{\text{d}} = (\sigma_2 - \sigma_1)/2$ 和 $\varepsilon_{\text{v}} = (\varepsilon_2 + \varepsilon_1)/2$, 其中 2 沿 y 方向, 1 沿 x 方向。

以上建立的微观力学模型中有如下参数需要确定: R , k_1^{s} , k_1^{n} , k_1^{m} , k_2^{s} , k_2^{n} , k_2^{m} , k^{L} , μ^{s} , $\mu^{\text{L}}\sigma^{\text{L}}$, μ^{m} , C_{N} , C_{S} 和 M_{C} 。以上参数的确定方法如下: R 可以通过颗粒尺寸确定; 其余参数具有明确的物理意义, 已在前文中解释, 其中 k_1^{s} , k_1^{n} , k_1^{m} , k_2^{s} , k_2^{n} , k_2^{m} 和 k^{L} 可以通过颗粒集合体的物理试验来确定, μ^{s} , $\mu^{\text{L}}\sigma^{\text{L}}$, μ^{m} , C_{N} , C_{S} 和 M_{C} 可以通过颗粒的物理试验确定。本文的参数取值方法是参考已有的离散元模拟结果和理论分析模型^[10, 12-13]进行取值, 采用了以下参数: $R = 1.14 \times 10^{-3} \text{ m}$, $\mu^{\text{m}} = 0.55$, $C_{\text{N}} = 3.58 \text{ N}$, $C_{\text{S}} = 0.7756 \text{ N}$, $\mu^{\text{s}} = 0.7$, $\mu^{\text{m}} = 0.02$, $M_{\text{C}} = 0.00585 \text{ N/m}$, 和 $k_1^{\text{m}} = \alpha k_2^{\text{s}}$, $k_1^{\text{n}} = \alpha k_2^{\text{n}}$, $k_2^{\text{n}} = \beta k_2^{\text{s}}$, $k_2^{\text{m}} = k_2^{\text{s}}$, $k_1^{\text{s}} = \alpha k_2^{\text{s}}$ 。

图 5 为计算的力 - 位移曲线与石英砂的试验及 DEM 模拟结果的对比, 采用的参数 $\alpha = 3$, $\beta = 2$ 和 $k_2^{\text{s}} = 5.25 \times 10^5 \text{ N/m}$ 。可见, 计算结果可以较好地模拟出颗粒破碎前随着位移增加力 F 逐渐增加及颗粒破碎时的应力跌落现象。

图 6, 7 分别给出了 α 和 β 变化时的应力 - 应变和体变 - 应变变化曲线。图 6 采用的计算参数为 $k_2^{\text{s}} = 5.25 \times 10^4 \text{ N/m}$, $\beta = 2$, $\alpha = 1.5, 3$, 图 7 采用的计算参数为 $k_2^{\text{s}} = 5.25 \times 10^4 \text{ N/m}$, $\alpha = 3$, $\beta = 0.6, 2$ 。

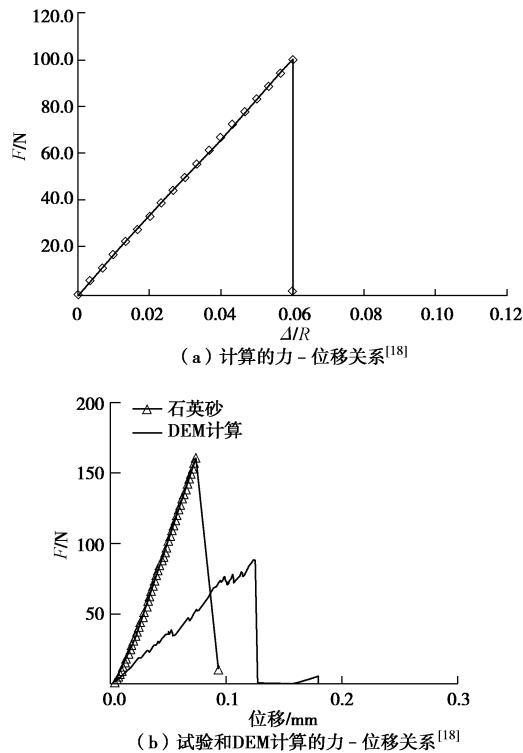
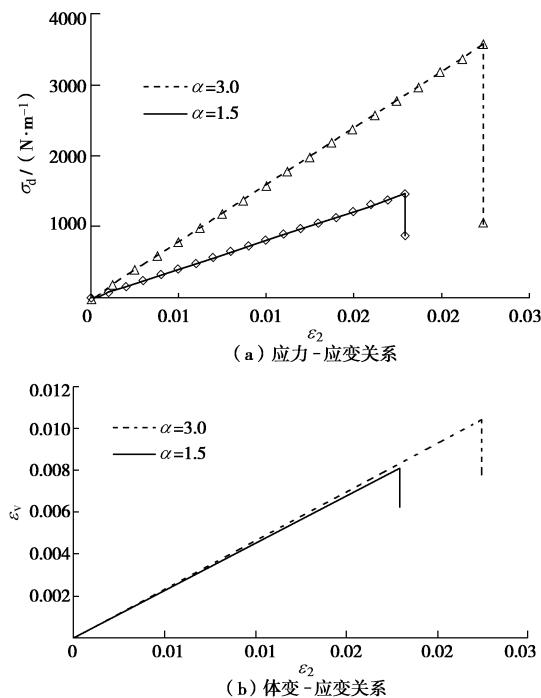


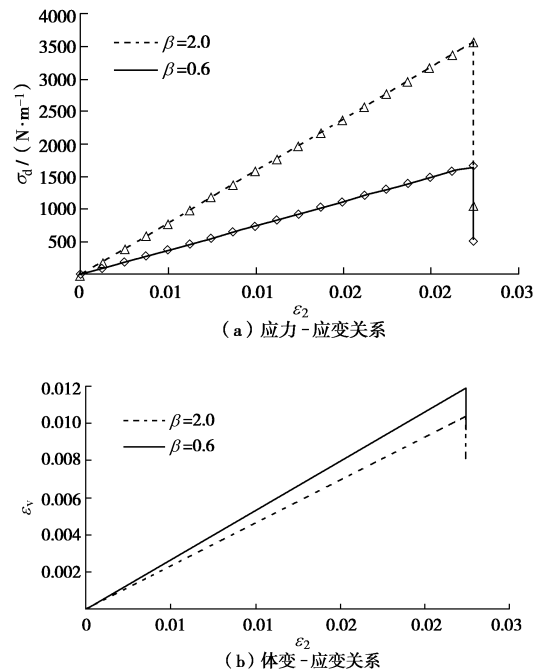
图5 计算和试验的力 - 位移曲线比较

Fig. 5 Comparison of force-displacement curves of computed and tested results

图6 α 变化时计算的应力 - 应变曲线Fig. 6 Curves of stress-strain with varying α

由图6可以看出,随着 α 的增大,颗粒破碎前的峰值应力逐渐增大,破碎发生时的应变也增大,且颗粒破碎时的应力跌落值也增大,体积收缩也更大。由图7可以看出,随着 β 的增大,颗粒破碎前的峰值应

力也逐渐增大,且颗粒破碎时的应力跌落值也增大,而体积收缩也变小。

图7 β 变化时计算的应力 - 应变曲线Fig. 7 Curves of stress-strain with varying β

5 结 论

基于热力学原理和微极理论,在颗粒尺度上构建了考虑颗粒破碎的微观力学模型,并进行了初步的计算分析和探讨了参数的影响。得到如下结论:

(1) 基于热力学和微极理论基础建立考虑颗粒破碎的微观力学模型为粒状材料的颗粒破碎研究提供了新的理论框架,为建立考虑微观机理的宏观本构模型提供了基础。

(2) 采用微观本构模型进行的初步计算结果与颗粒破碎的试验结果对比表明所提出的微观力学模型可以定性的模拟颗粒破碎前及破碎时的加载过程,可以模拟颗粒破碎集合体破碎前的应力增加和破碎时的应力跌落现象。

由于本文的微观力学模型是基于图2的颗粒集合体模型建立的,而实际的颗粒材料的排列是随机的且粒径大小是变化的,所以把本文的研究结果推广应用到实际的岩土工程还需要进行深入的研究。

参考文献:

- [1] 沈珠江, 徐 刚. 堆石料的动力变形特性[J]. 水利水运科学, 1996(2): 143 - 150. (SHEN Zhu-jiang, XU Gang. Dynamic deformational properties of rockfill materials[J]. Hydro-science and Engineering, 1996(2): 143 - 150. (in

- Chinese))
- [2] BRADY B H G, BROWN E T. Rock mechanics for underground mining[M]. New York: Kluwer Academic Publishers, 2005.
- [3] EINAV I. Breakage mechanics-part I: theory [J]. Journal of the Mechanics and Physics Of Solids, 2007, **55**: 1274 - 1297.
- [4] SUBERO J, GHADIRI M. Breakage patterns of agglomerates[J]. Powder Technology, 2001, **120**: 232 - 243.
- [5] ANDERSSSEN R S, HARASZI R. Characterizing and exploiting the rheology of wheat hardness[J]. Eur Food Res Technology, 2009, **229**: 159 - 174.
- [6] DAOUADJI A, HICHER P Y, RAHMA A. An elastoplastic model for granular materials taking into account grain breakage[J]. Eur J Mech A/Solids 20, 2001: 113 - 137.
- [7] CHÁVEZ C, ALONSO E E. A constitutive model for crushed granular aggregates which includes suction effects[J]. Soils and Foundations, 2003, **43**(4): 215 - 227.
- [8] 米占宽, 李国英, 陈铁林. 考虑颗粒破碎的堆石体本构模型[J]. 岩土工程学报, 2007, **29**(12): 1865 - 1869. (MI Zhan-kuan, LI Guo-ying, CHEN Tie-lin. Constitutive model for rockfill materials considering grain crushing[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2007, **29**(12): 1865 - 1869. (in Chinese))
- [9] 迟世春, 贾宇峰. 土颗粒破碎耗能对罗维剪胀模型的修正[J]. 岩土工程学报, 2005, **27**(11): 1266 - 1269. (CHI Shi-chun, JIA Yu-feng. Rowe's stress-dilatancy model modified for energy dissipation of particle breakage[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2005, **27**(11): 1266 - 1269. (in Chinese))
- [10] CHENG Y P, NAKATA Y, BOLTON M D. Discrete element simulation of crushable soil[J]. Géotechnique, 2003, **53**(7): 633 - 641.
- [11] ALAEI E, MAHBOUBI A. A discrete model for simulating shear strength and deformation behavior of rockfill material, considering the particle breakage phenomenon[J]. Granular Matter, 2012, **14**: 707 - 717.
- [12] TORDESILLAS A, LIU E. Evolution of mesoscopic granular clusters in comminution systems: a structural mechanics model of grain breakage and force chain buckling[OB/OL]. DOI 10.1007/s00161-014-0336-y.
- [13] 刘恩龙, 陈生水, 傅中志. 颗粒破碎的微观力学模拟[J]. 应用力学学报, 2014, **31**(5): 671 - 677. (LIU En-long, CHEN Sheng-shui, FU Zhong-zhi. Micromechanical Modeling of Grain Crushing[J]. Chinese Journal of Applied Mechanics, 2014, **31**(5): 671 - 677. (in Chinese))
- [14] WASH S D C, TORDESILLAS A. A thermomechanical approach to the development of micropolar constitutive models of granular media[J]. Acta Mechanica, 2004, **167**: 145 - 169.
- [15] TORDESILLAS A, MUTHUSWAMY M. On the modelling of confined buckling of force chains[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2009, **57**: 706 - 727.
- [16] LI Q M. Energy correlations between a damage macroscopic continuum and its sub-scale[J]. International Journal of Solids and Structures, 2000, **37**: 4539 - 4556.
- [17] TORDESILLAS A, MUTHUSWAMY M. A thermomicromechanical approach to multiscale continuum modelling of dense granular materials[J]. Acta Geotechnica, 2008, **3**(3): 225 - 240.
- [18] WANG J, YAN H. On the role of particle breakage in the shear failure behaviour of granular soils by DEM[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2013, **37**(8): 832 - 854.