

DOI: 10.11779/CJGE201809018

一种基于离散元的模拟颗粒破碎方法

刘 苏, 王剑锋

(香港城市大学建筑学与土木工程学系, 香港 999077)

摘要: 为模拟颗粒破碎对散体材料应力 - 应变特性产生的显著影响, 提出了一种改进的基于离散元的模拟颗粒破碎的方法。首先将颗粒复杂的受力状态简化成颗粒球心附近的最大拉应力并假定颗粒破碎服从最大拉应力准则。当颗粒满足破碎条件时, 将破碎颗粒的直径缩小。当由缩小颗粒直径导致的质量损失达到某一规定值时, 向样本内的孔隙插入新颗粒。为模拟破碎产生碎片的颗粒级配, 新生成的颗粒尺寸服从分形分布, 同时, 为考虑颗粒强度的变异性和尺寸效应, 未破碎颗粒、已破碎颗粒和破碎产生的碎片的抗拉强度均服从 Weibull 分布。该方法满足质量守恒条件, 且适用于能在超级计算机上并行运行的开源离散元软件。采用本文方法模拟了一维压缩和直剪试验并与室内试验结果进行对比, 结果表明本文方法模拟颗粒破碎是可行的。

关键词: 离散元; 颗粒破碎; Weibull 分布; 分形分布

中图分类号: TU443 文献标识码: A 文章编号: 1000-4548(2018)09-1706-08

作者简介: 刘 苏(1988-), 男, 湖南汉寿人, 博士研究生, 主要从事离散元模拟方面的研究工作。E-mail: billsouls@163.com。

An approach for modelling particle breakage based on discrete element method

LIU Su, WANG Jian-feng

(Department of Architecture and Civil Engineering, City University of Hong Kong, Hong Kong 999077, China)

Abstract: The particle breakage has a significant effect on the stress-strain behavior of granular materials. An improved approach for modelling the particle breakage is proposed based on the discrete element method (DEM). This approach first simplifies the complicated stress condition into the maximum tensile one. A particle is allowed to break if the maximum tensile stress acting on it exceeds its tensile strength. The radius of the fractured particle is reduced. When the accumulated loss in mass reaches the critical value, new particles are inserted into the sample. The newly generated particles satisfy a fractal condition. In order to take the variability and size effect in particle strength into consideration, the tensile strengths of the uncrushed particles, the crushed particles and the newly generated particles all satisfy the Weibull distribution. This approach also obeys the mass conservation and can be implemented into the classical open-source package, which allows parallel computation in a multi-processor system. The validity of this approach is demonstrated by comparing the DEM simulation results of one-dimensional compression and direct shear tests with the data from the laboratory tests.

Key words: discrete element method; particle breakage; Weibull distribution; fractal distribution

0 引言

颗粒破碎对散体材料的应力 - 应变特性有显著的影响^[1]。目前, 基于离散元模拟颗粒破碎的方法主要有以下 3 种: ①由多个小颗粒通过胶结接触模型连接而成的团粒, 当胶结处的拉应力或剪应力大于胶结的抗拉强度或抗剪强度时, 胶结失效, 颗粒发生破碎; ②当颗粒的受力状态满足设定的破碎条件时, 用小颗粒替换破碎的颗粒; ③当颗粒的受力状态满足设定的破碎条件时, 缩小该颗粒的直径, 并在孔隙中插入新的颗粒来满足质量守恒的条件。

基于第一种方法, 刘洋等^[2]用 PFC^{2D} 程序研究了颗粒形状对块体破碎的影响; 赵金凤等^[3]探究了胶结

强度对二维直剪试验的影响, 发现抗剪强度随胶结强度的增大而增加; 周博等^[4]研究了双轴压缩试验中剪切破碎带的形成以及各向异性的演化过程; 田湖南等^[5]考虑了土石混合物的双轴压缩试验中碎石的形状对强度的影响, 发现碎石磨圆度越好, 土石混合物的强度越低; 韩洪兴等^[6]发现堆石料中的大颗粒先破碎; 张家铭等^[7]分析了不同桩形在打桩过程中的应力场分布规律; Liu 等^[8]模拟了砂土中的打桩过程, 得到了随打

基金项目: 国家自然科学基金项目(51379180, 41402279); 深圳市科技计划基础研究项目(JCYJ20150601102053063); 香港研资局优配研究金项目(CityU 122813)

收稿日期: 2017-07-07

入深度加深保持不变的应力云图, 并对桩侧土的边界条件做了详细分析^[9]; 蒋明镜等^[10]在胶结接触模型中考虑了胶结力和摩擦力的共同作用, 得到了改进的蒋氏模型; 周健等^[11]通过对单轴抗压试验和颗粒接触试验的三维模拟结果进行比较, 发现标定后的同种材料的接触模型参数相差较大, 因此建议在不同的试验中, 参数需分别标定; 周伦伦等^[12]研究了真三轴应力状态下的应力-应变特性及级配的演化, 发现主应力参数对结果影响很大。该方法能模拟复杂的颗粒形状, 且可较准确的模拟破碎的演化过程。在二维模拟中一个团粒一般由 20~30 个小颗粒组成, 在三维模拟中一个团粒一般由上百个小颗粒组成^[13], 致使该方法不适用于模拟包含颗粒数目较多的问题。

基于第二种方法, Lobo-Guerrero 等^[14]用 PFC^{2D}模拟了桩的打入过程, 发现颗粒破碎集中在桩端和桩侧; Ben-Nun 等^[15]在一维压缩的模拟中的级配演化和试验结果吻合良好; McDowell 等^[16]则在模拟中进一步考虑了颗粒强度的变异性, 并假定颗粒强度服从 Weibull 分布; Zhou 等^[17]模拟了真三轴试验, 发现围压对各向异性有影响。该方法适用于模拟包含颗粒较多的问题, 但是在颗粒替换的过程中, 会出现质量不守恒或颗粒重叠导致的接触力过大等问题。

基于第三种方法, Hanley 等^[18]在超级计算机上运用开源软件 LAMMPS 研究了三轴试验中颗粒破碎的多少和临界状态线的相关性。在该研究中, 颗粒所能承受的最大接触力是一个服从均匀分布的随机量。换言之, 某颗粒所能承受的最大接触力随着运行时步的增加而不断变化。在模拟过程中, 通过不断插入单一尺寸的小颗粒来弥补由破碎颗粒的直径缩小所导致的质量损失。该概率方法能模拟具有很多颗粒的问题。

在满足质量守恒的前提下, 为了在包含颗粒数较多的问题中更好的模拟颗粒破碎, 本文改进了文献[18]中模拟颗粒破碎的方法, 使颗粒的强度服从 Weibull 分布, 且破碎产生碎片的颗粒级配更接近试验结果。

1 数值方法

1.1 LIGGGHTS

本文采用基于 LAMMPS 的开源软件 LIGGGHTS 建立离散元模型。这两款开源软件都可在超级计算机上通过消息传递接口 (MPI) 技术和空间划分实现并行计算。并行计算大大提高了离散元模拟包含大量颗粒问题的能力, 这使得 LAMMPS 和 LIGGGHTS 在岩土问题模拟中得到越来越广泛的运用^[18-20]。

在超级计算机上运行离散元模型所需时间主要由单个核心的性能、运行的核心数及核心之间和节点之

间的消息传递效率来决定。本文中的离散元模拟是在长沙超算中心的“天河一号”和香港城市大学科学与工程学院的高性能计算机集群 (HPC) 上完成的。图 1 给出了在“天河一号”上一个包含 257466 个颗粒和在“HECTor Phase 3”上一个包含 351248 个颗粒^[21]的一维压缩模型运行 100000 时步所花时间。由于节点之间传递的信息量随着节点数目的增加而增大, 导致模拟所花时间不随节点数目的增加而线性减少。当增加一个节点所减小的时间小于由于信息传递量增加导致的时间增加时, 甚至会出现计算效率随节点数目增加而降低的情况。因此, 从计算效率的角度考虑, 在“天河一号”上运行离散元模型所占用节点数将不会超过 20 个。

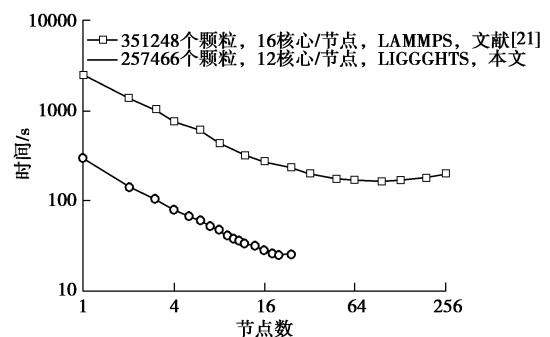


图 1 LIGGGHTS 在 12 核心/节点和 LAMMPS 在 16 核心/节点的超级计算机并行预算效率

Fig. 1 Scaling of LIGGGHTS on 12-core/node HPC and LAMMPS on 16-core/node HPC facility

1.2 单颗粒的应力和强度

单颗粒的破碎强度通常是通过单颗粒的压碎试验得到的。通过假定单颗粒的压碎试验类似巴西圆盘劈裂试验, 可把竖直方向的抗拉强度当做颗粒的破碎强度。

在压缩试验中, 颗粒的受力状态比在单颗粒压碎试验中复杂很多。为了更方便的模拟颗粒破碎, 本文假定在压缩试验中, 颗粒破碎也是由抗拉强度控制的。采用此假定, Zhou 等^[22]成功在平面应变压缩试验的模拟中得到了和室内试验结果类似的压缩和破碎行为。本文将通过计算颗粒所受的平均应力来考虑其复杂的受力状态。当一个颗粒所受最大拉应力大于其抗拉强度时, 该颗粒发生破碎。

颗粒的平均应力 (σ_{ij}) 可表示为

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V_p} \sum_{c=1}^{n_c} n_i^c f_j^c \quad (i, j = x, y, z) \quad . \quad (1)$$

式中 n_c 是该颗粒和周围颗粒的接触数目; n_i^c 和 f_j^c 分别是第 c 个接触的单位法向向量的 i 分量和接触力的 j 分量; V_p 是该颗粒的体积。三维问题中, 第一主

应力 (σ_1) 和第三主应力 (σ_3) 可以表示为

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1 &= \frac{I_1}{3} + \frac{2}{3} (\sqrt{I_1^2 - 3I_2}) \cdot \cos\varphi, \\ \sigma_3 &= \frac{I_1}{3} + \frac{2}{3} (\sqrt{I_1^2 - 3I_2}) \cdot \cos\left(\varphi - \frac{4\pi}{3}\right), \\ I_1 &= \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}, \\ I_2 &= \sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{yy}\sigma_{zz} + \sigma_{zz}\sigma_{xx} - \sigma_{xy}^2 - \sigma_{yz}^2 - \sigma_{zx}^2, \\ I_3 &= \sigma_{xx}\sigma_{yy}\sigma_{zz} + 2\sigma_{xy}\sigma_{yz}\sigma_{zx} - \sigma_{xx}\sigma_{yz}^2 - \sigma_{yy}\sigma_{zx}^2 - \sigma_{zz}\sigma_{xy}^2, \\ \varphi &= \frac{1}{3} \arccos\left(\frac{2I_1^3 - 9I_1I_2 + 27I_3}{2(I_1^2 - 3I_2)^{3/2}}\right). \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

根据修正的巴西圆盘试验破坏准则^[23], 颗粒圆心附近的最大拉应力 (σ_t) 和第一主应力垂直, 并可表达为

$$\sigma_t = \frac{\sigma_1 - 3\sigma_3}{2} \quad . \quad (3)$$

由于砂颗粒存在初始裂隙, 单一粒径的同种砂颗粒的强度变异性很大。Weibull 分布常用于描述这类强度变异性:

$$P_s = \exp\left[-\left(\frac{\sigma_f}{\sigma_{f0}}\right)^m\right] \quad . \quad (4)$$

式中 P_s 是当拉应力为 σ_f 时某颗粒的存活概率; σ_{f0} 是 37% 的颗粒存活对应的特征拉应力; m 是 Weibull 模量。 m 值随颗粒强度变异性的减小而增大。 P_s 也可理解为某颗粒强度大于 σ_f 的概率。该颗粒的抗拉强度大于 σ_f 和不大于 σ_f 构成了一组互斥且周延的概率事件组合。因此, 某颗粒强度不大于 σ_f 的概率为

$$P_{ts} = 1 - P_s = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma_f}{\sigma_{f0}}\right)^m\right] \quad . \quad (5)$$

概率密度函数 (PDF) 是一个描述随机变量在某个取值点附近的可能性的函数, 并可由对应的累积分布函数 (CDF) 求导获得。因此, 式 (5) 对应的 PDF 可以通过对其求导获得, 为

$$p_{ts} = \begin{cases} \frac{m}{\sigma_{f0}} \left(\frac{\sigma_f}{\sigma_{f0}}\right)^{m-1} \exp\left[-\left(\frac{\sigma_f}{\sigma_{f0}}\right)^m\right] & \sigma_f \geq 0 \\ 0 & \sigma_f < 0 \end{cases} \quad , \quad (6)$$

式中, p_{ts} 为某颗粒抗拉强度等于 σ_f 的概率密度函数。

然而, 由于 LIGGGHTS 中不包含 Weibull 数学函数, 导致无法直接根据式 (6) 给颗粒赋强度值。一种可行的方法是用 Gaussian 分布来拟合 Weibull 分布。图 2 给出了 3 个不同参数的 Weibull 分布的 PDF 曲线, 曲线由实线表示并以 “PDF- m - σ_{f0} ” 命名。Gaussian 分布的 PDF 为

$$p_{ts} = \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2\pi}} \exp\left[-\frac{(\sigma_f - u)^2}{2\sigma^2}\right] \quad , \quad (7)$$

式中, u 是随机变量的均值; a 是随机变量的标准差。3 个 Weibull 分布的最佳 Gaussian 拟合曲线的 u 和 a 的值分别为: 2.64 MPa 和 1.011 MPa, 5.28 MPa 和 2.022 MPa, 13.2 MPa 和 5.055 MPa。用 Gaussian 分布 PDF 拟合 Weibull 分布 PDF 的优势在于当颗粒抗拉强度的概率密度为 p_{ts} 时, 可近似通过 Gaussian 变量来赋值:

$$\sigma_f(u, a) = G(-\infty, +\infty) = G(u, a) \quad , \quad (8)$$

式中, $G(-\infty, +\infty)$ 是通过 LIGGGHTS 中的 “normal (u, a, seed)” 数学函数生成的 Gaussian 变量。

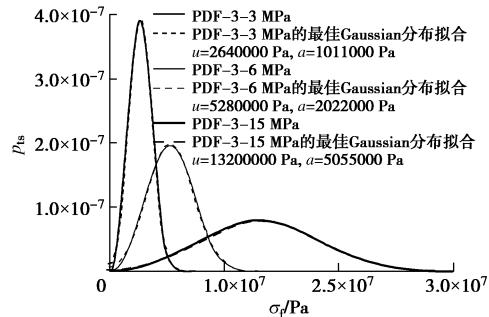


图 2 Weibull 分布 PDF 曲线和最佳 Gaussian 分布 PDF 拟合曲线的对比

Fig. 2 Comparison between Weibull distribution PDF curves and their best-fitting Gaussian ones

根据式 (8) 赋值的颗粒强度有小概率为负值。为了避免强度为负值, 取 $G(-\infty, +\infty)$ 的绝对值:

$$\sigma_f(u, a) = |G(-\infty, +\infty)| = |G(u, a)| \quad . \quad (9)$$

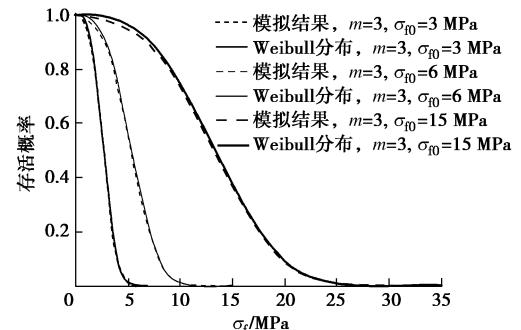


图 3 基于式 (9) 的离散元模拟中单一粒径的存活概率与理论 Weibull 分布对比

Fig. 3 Comparison between survival probabilities of monosized particles from DEM result based on Equation (9) and those from theoretical results of Weibull distribution

给定 Weibull 分布的 σ_{f0} 和 m 值, Gaussian 分布的 u 和 a 值可以通过最佳拟合得到。服从 Weibull 分布且半径为 r 的颗粒抗拉强度可近似据式 (9) 赋值。根据式 (9) 得到的离散元模拟中单一粒径的颗粒存活概率与对应的 Weibull 分布理论曲线对比结果如图 3 所示。虽然当强度较低时有少许差别, 但是离散元模拟中的结果整体上和理论曲线吻合。

此外, 颗粒抗拉强度还具有尺寸效应^[24-25]。这种尺寸效应可被描述为

$$\frac{\sigma_{f0}}{\sigma_{f0,b}} = \left(\frac{r}{r_b} \right)^{-\frac{3}{m}}, \quad (10)$$

式中, $\sigma_{f0,b}$ 是半径为 r_b 颗粒的特征抗拉强度。将式(9)代入式(10)中, 可得半径为 r 的颗粒抗拉强度为

$$\sigma_f(u, a) = |G(u_b, a_b)| \cdot \left(\frac{r}{r_b} \right)^{-\frac{3}{m}}. \quad (11)$$

Leighton Buzzard 石英砂 (LBS) 的 Weibull 模量约等于 3^[25]。对于 $m=3$, 颗粒的抗拉强度恰和尺寸成反比, 意味着小尺寸颗粒的强度高于大尺寸颗粒的强度。在模拟中, 每一个新生成的颗粒都被赋予一个由式(11)求得的抗拉强度。而颗粒的最大拉应力可由式(1)、(2)及(3)求得。如果某个颗粒所受最大拉应力大于其抗拉强度, 该颗粒发生破碎。

1.3 颗粒破碎的模拟

依据单颗粒压碎试验^[26], 采取缩小破碎颗粒半径 50% 的方法模拟破碎。被缩小半径的颗粒将会和周围颗粒失去接触, 这会引起破碎颗粒附近的应力瞬间减小, 这和单颗粒压碎试验中观测到的结果吻合^[24], 破碎后的颗粒能在模拟中继续参与受力^[18]。在缩小颗粒半径的同时, 该颗粒的抗拉强度也据式(11)而被更新。

当累积损失的质量达到 $7\pi(D_{50})^3/96$ 时, 通过向孔隙中随机插入新颗粒 (圆球) 来模拟破碎产生的碎片及解决质量不守恒的问题, 其中 D_{50} 是初始中值粒径。 $7\pi(D_{50})^3/96$ 等于一个直径为 D_{50} 的颗粒发生破碎, 直径被缩小到 $0.5D_{50}$ 时损失质量的 50%。虽然不同应力水平下的颗粒级配可通过筛分试验得到, 但颗粒破碎产生的碎片尺寸分布的试验数据却鲜见。鉴于此, 将采用由单颗粒破碎试验得到的碎片尺寸分布^[26]。文献[26]发现碎片尺寸服从一个分形维数 (D_{fd}) 为 2.0 的分形分布, 碎片的尺寸分布可表述为

$$N \propto r^{-D_{fd}}, \quad (12)$$

式中, N 是颗粒半径大于 r 的颗粒数目。式(12)的 PDF 可对其求导得

$$n_p \propto D_{fd} r^{-D_{fd}-1}, \quad (13)$$

式中, n_p 是碎块半径等于 r 的概率密度函数。当 $D_{fd}=2.0$ 时, 半径大于 r_1 且小于 r_2 ($r_2 > r_1$) 的碎块总质量 (M_f) 可通过对 n_p 在区间 $[r_1, r_2]$ 上求定积分得

$$M_f \propto \int_{r_1}^{r_2} 2r^{-3} \cdot \frac{4\pi}{3} r^3 dr = \frac{8\pi}{3} (r_2 - r_1). \quad (14)$$

据式(14)可知, 新生成的碎块的质量和其半径的区间成正比。据式(12)和(13)可知, 碎块的数

量随着 r 的减小而快速增加。为了控制计算量, 新生成的碎块半径将被限定在 0.04~0.2 mm。服从分形分布且 $D_{fd}=2.0$ 的颗粒权重如表 1 所示。

表 1 为满足质量守恒而插入颗粒的质量和数量百分比

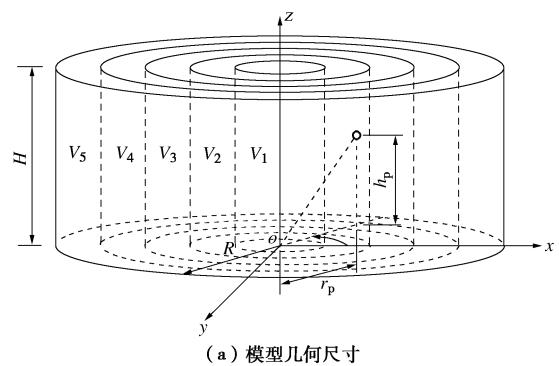
Table 1 Percentages of mass and number of inserted particles for mass conservation

r/mm	0.04~0.08	0.08~0.12	0.12~0.16	0.12~0.2
质量百分比/%	25	25	25	25
数量百分比/%	2.34	5.06	14.47	78.13

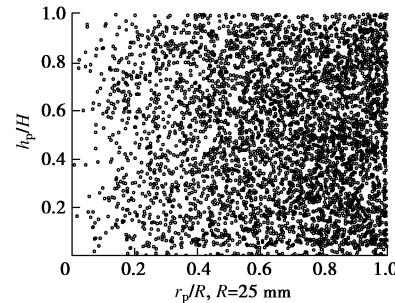
采用上述模拟颗粒破碎方法的主要目的是为了考虑颗粒破碎时周围应力的瞬时减小及满足质量守恒。需要注意的是, 本文无意通过上述简化方法来准确的模拟颗粒的破碎行为。

2 一维压缩的离散元模拟

一个常规尺寸的压缩试验容器的直径 ($2R$) 和高 (H) 分别为 50 和 20 mm。为了减小顶板和底板之间的应力差, 模型中所有边界的摩擦系数都设为 0.05。采用非零的边界摩擦系数是为了防止颗粒整体绕容器的 z 轴 (见图 4(a)) 旋转。颗粒样本通过半径膨胀法生成。颗粒直径服从 0.6~1.2 mm 区间上的均匀分布。接触模型采用 LIGGGHTS 已有的 Hertz 和抗转动模型, 所取参数值见表 2。转动摩擦可以近似考虑天然散体材料具有的不规则形状的影响, 使模拟结果更接近真实情况。压缩试验通过以恒定速度 0.2 mm/s 向下移动上顶板来实现, 并以 “ $\sigma_{f0}-n_0$ ” 命名, 其中 n_0 为初始孔隙率。



(a) 模型几何尺寸



(b) $D_{fd}=1$ 且 $\sigma_v=15.8$ MPa 时破碎颗粒在过 z 轴平面上的投影

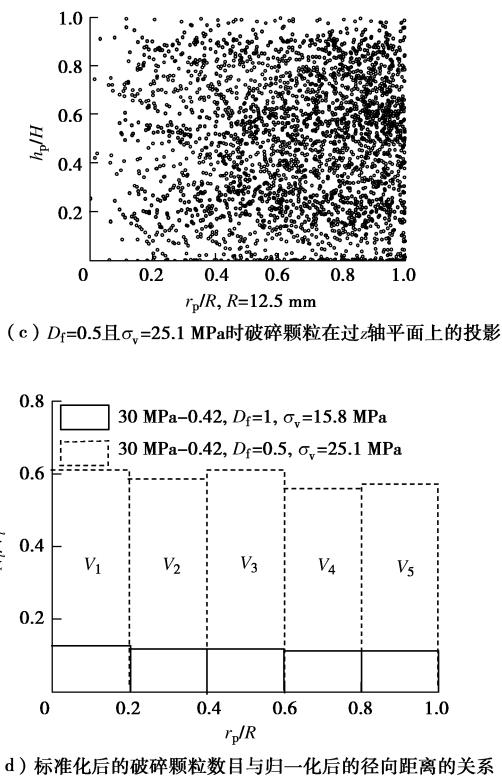


图 4 模型几何尺寸及颗粒破碎结果

Fig. 4 Model geometry and results of fractured particles

表 2 接触模型所取参数值

Table 2 Input parameters for contact law

参数	杨氏模量/Pa	泊松比	恢复系数	摩擦系数	抗转动系数
值	1×10^9	0.3	0.5	0.5	0.2

在压缩开始前, 常规尺寸容器中包含的颗粒数目是 75169 (见图 5 (a)), 当竖直压力 (σ_v) 增加到 15.8 MPa 时, 由于颗粒破碎产生的碎片, 颗粒数目快速升至 494572 (见图 5 (b))。为了缩减计算成本, 在保持其他几何尺寸不变的前提下, 容器的尺寸常被缩小, 缩小的比例因子为 D_f ($0 < D_f < 1$)。如图 5 (a) 和 5(c) 所示, 当 $D_f=0.5$ 时, 对应的容器尺寸为 25 mm × 10 mm, 颗粒数目相较于 $D_f=1$ 时减少了 87.5%。对于 $D_f=0.5$ 和 $D_f=1$, 孔隙率 (n) 与竖直压力的关系如图 6 所示。由图可知, 两条压缩曲线基本吻合, 意味着将常规尺寸容器缩小一半对宏观结果影响很小。

图 4 (b) 和 4 (c) 给出了破碎颗粒在柱坐标系中 rz 面上的投影, 且以 $r_p/R-h_p/H$ 为 $r-z$ 轴, 其中 r_p 和 h_p 分别为破碎颗粒到 z 轴和 xy 平面的距离; r_p/R 和 h_p/H 分别为归一化的径向距离和高度。破碎颗粒在两组模拟中沿 z 轴方向都均匀分布, 意味着两个模型的竖向边界效应都不明显, 且 0.2 mm/s 的加载速率足以满足准静态的加载条件。由于环向的总颗粒数目随径向距离增大而增加, 使得破碎颗粒数目在两组模拟中沿径

向都呈随径向距离增大而增加的趋势。将容器沿径向等分为 1 个圆柱体和 4 个空心圆筒 (见图 4 (a)), 将其中的破碎颗粒数目 (N_i) 对体积 (V_i) 做标准化处理。在两组试验中, 标准化后的破碎颗粒数目 (N_i/V_i) 整体上是 r_p/R 的常函数 (见图 4 (d))。这说明两个模型的径向边界效应也不明显。综上所述, 以比例因子 0.5 缩小容器尺寸对压缩试验的结果影响较小, 因此后文所有模拟中将取 $D_f=0.5$ 。考虑到颗粒总数目因颗粒破碎急剧增加 (见图 5 (b) 和 5 (d)), 且随着样本逐渐变密实, 插入碎片颗粒将愈加困难, 当压缩曲线达到正常固结线 (NCL) 后, 压缩可能随时中止。

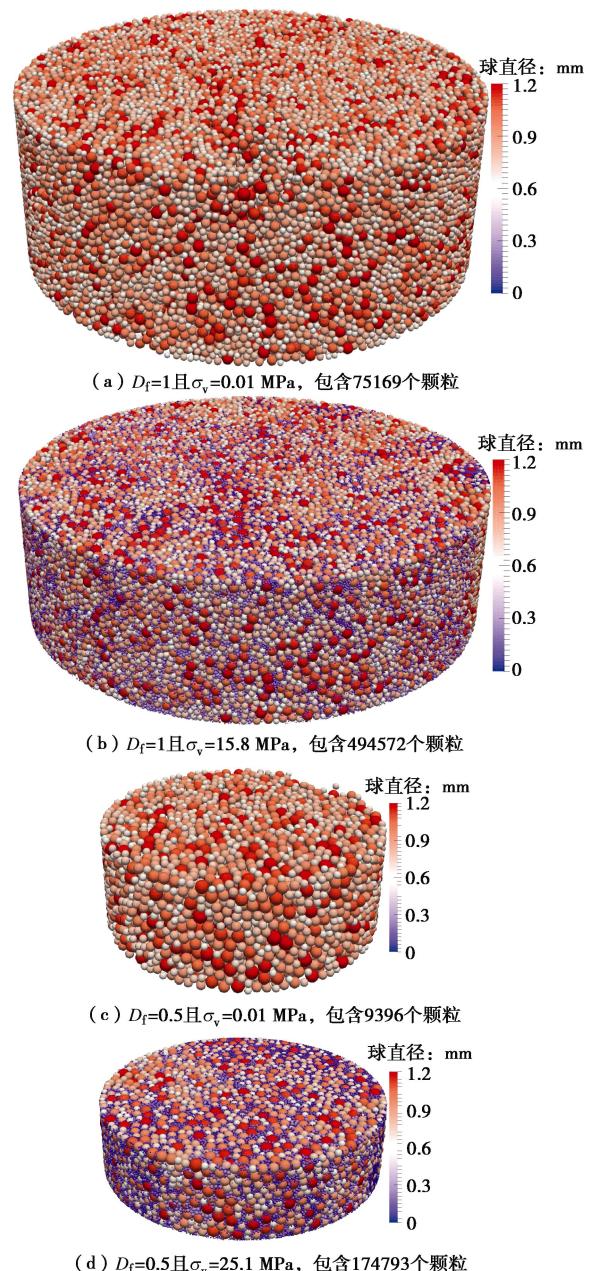


图 5 数值试样

Fig. 5 Numerical model

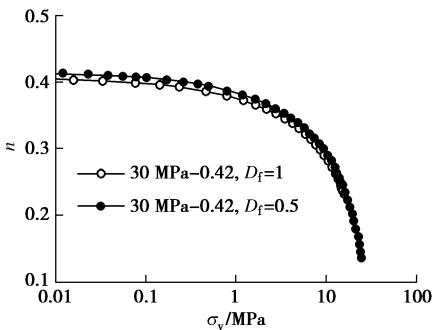
图 6 $D_f=0.5$ 和 $D_f=1$ 的压缩曲线Fig. 6 Normal compression behavior for $D_f=0.5$ and $D_f=1$

图 7, 8 给出了两种强度 ($\sigma_{f0}=15$ 或 30 MPa) 的颗粒在两种不同的初始孔隙率 ($n_0=0.38$ 或 0.42) 的条件下的一维压缩试验模拟结果。将破碎的颗粒数目 (ΔN_U) 和压缩开始前的颗粒总数目 (N_U) 的比值 ($\Delta N_U/N_U$) 定义为颗粒的破碎率 (η)。对于给定的初始孔隙率, 当竖直应力较小时 ($\sigma_v < 1$ MPa), 由于颗粒破碎很少 (见图 8), 两种不同强度的颗粒的压缩曲线基本吻合 (见图 7)。随着竖直应力的逐渐增大 (1~4 MPa), 颗粒破碎率差别的逐渐显现导致了原本重叠的曲线逐渐分离。对于同种强度的颗粒, 当竖直应力较大时 ($\sigma_v > 4$ MPa), 不同初始孔隙率的曲线逐渐合并到同一条 NCL。

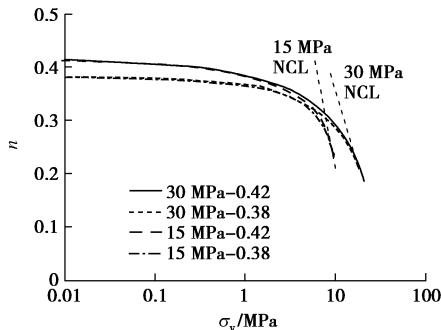
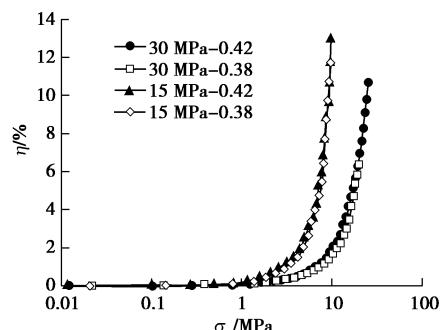
图 7 颗粒强度 (σ_{f0}) 和初始孔隙率 (n_0) 对压缩结果的影响Fig. 7 Effects of particle strength (σ_{f0}) and initial porosity (n_0) on normal compression behavior

图 8 颗粒破碎率

Fig. 8 Percentage of fractured particles

图 9 (a) 给出了“ 30 MPa- 0.42 ”试验的颗粒级配

演化。为了验证模拟结果, 图 9 (b) 给出了 Ottawa 石英砂的室内试验结果作为对比。虽然室内试验的竖直应力大于离散元模拟的竖直应力, 但是考虑到模拟中颗粒强度和破坏准则和真实试验的差别, 对比还是能提供有用信息的。模拟和室内试验的颗粒级配演化规律类似, 且都在最小初始颗粒尺寸附近出现了拐点。该拐点的出现是由于新生成颗粒的最大尺寸小于最小初始颗粒尺寸造成的。

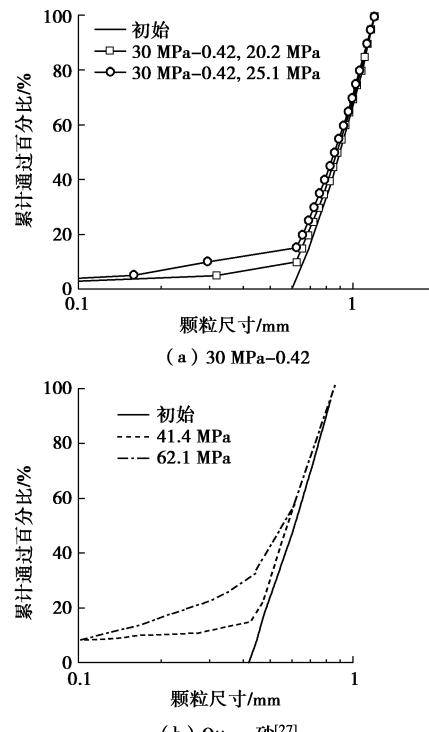


图 9 颗粒级配演化

Fig. 9 PSD evolution

3 直剪试验的离散元模拟

通过三维直剪试验的模拟, 将进一步验证本文方法的可行性。直剪盒的大小 (长×宽×高) 为 $60\text{ mm} \times 60\text{ mm} \times 30\text{ mm}$, 生成样本的方法、颗粒级配及采取的接触模型参数均与一维压缩试验一样。图 10 给出了“ 30 MPa- 0.42 ”和“ 30 MPa- 0.38 ”直剪试验在不同围压下 (250 kPa 和 1 MPa) 的模拟结果, 并与 LBS 的室内直剪试验结果^[28]做比较。其中, 应力比 (τ/σ) 为剪应力 (τ) 和围压 (σ) 的比值, 体应变膨胀为正。由图可知: 所有试验均呈现剪胀特性; “ 30 MPa- 0.38 , 250 kPa”的模拟结果和“LBS, 251 kPa”的室内试验结果相似; 对于给定的初始孔隙率, 极限状态应力比和体应变随着围压的增大而减小; 对于给定的围压, 极限状态应力比和体应变随着初始孔隙率的减小而增大; 初始孔隙率和围压对临界状态应力比的影响很小, 但对临界状态体应变有明显影响。综上

所述,本文所提出的模拟颗粒破碎的方法能较好地还原真实试验中破碎产生的影响。

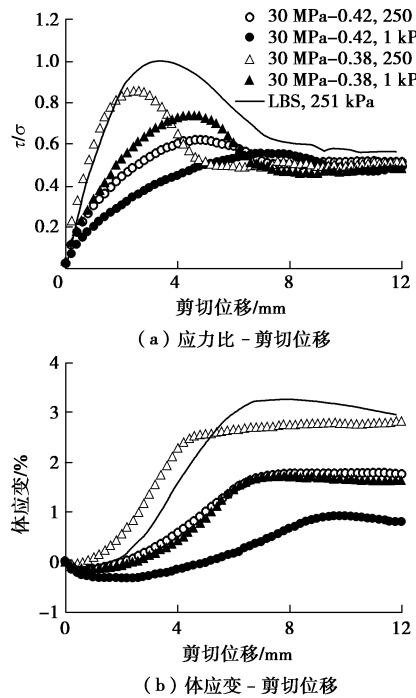


图 10 直剪试验的离散元模拟结果和室内试验结果对比

Fig. 10 Comparison of direct shear results from simulations and experiments

4 结 论

本文对离散元模拟颗粒破碎方法进行了改进,以满足质量守恒条件,且未破碎颗粒、已破碎颗粒和破碎产生碎片的抗拉强度均服从 Weibull 分布,新生成的颗粒尺寸服从分形分布。本文方法可较好地模拟破碎产生碎片的颗粒级配,能较好地模拟颗粒的一维压缩和直剪试验的特征,并得到以下结论:

(1) 在超级计算机上运行可并行运算的开源软件可大大提高离散元模拟的计算效率,但由于节点之间的信息传递量随着节点数目的增加而增大,模拟所花时间不随节点数目的增加而线性减少。

(2) 在压缩开始阶段,初始孔隙率相同但颗粒强度不同的两条曲线重合。随着竖向压力的不断增大,不同强度颗粒破碎率的差别也随之增大,导致原本重合的曲线逐渐分离,而同一强度不同初始孔隙率的两种样本的压缩曲线会逐渐合并到一条 NCL。

(3) 由于破碎产生的碎片的最大尺寸小于最小初始颗粒尺寸,导致了级配曲线上拐点的出现。

参考文献:

- [1] 尹振宇,许强,胡伟.考虑颗粒破碎效应的粒状材料本构研究:进展及发展[J].岩土工程学报,2012,34(12):

- 2170 - 2180. (YIN Zhen-yu, XU Qiang, HU Wei. Constitutive relations for granular materials considering particle crushing: review and development[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2012, 34(12): 2170 - 2180. (in Chinese))
- [2] 刘洋,李晓柱,吴顺川.多块体形状堆石体碾压颗粒破碎数值模拟[J].岩土力学,2014,35(11): 3269 - 3280. (LIU Yang, LI Xiao-zhu, WU Shun-chuan. Numerical simulation of particle crushing for rockfill of different particles shape under rolling compaction[J]. Rock and Soil Mechanics, 2014, 35(11): 3269 - 3280. (in Chinese))
- [3] 赵金凤,严颖,季顺迎.基于离散元模型的土石混合体直剪试验分析[J].固体力学学报,2014,35(2): 124 - 134. (ZHAO Jin-feng, YAN Ying, JI Shun-ying. Analysis of direct shear test of soil-rock mixture based on discrete element model[J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2014, 35(2): 124 - 134. (in Chinese))
- [4] 周博,黄润秋,汪华斌,等.基于离散元法的砂土破碎演化规律研究[J].岩土力学,2014,35(9): 2709 - 2716. (ZHOU Bo, HUANG Run-qiu, WANG Hua-bin, et al. Study of evolution of sand crushability based on discrete elements method[J]. Rock and Soil Mechanics, 2014, 35(9): 2709 - 2716. (in Chinese))
- [5] 田湖南,焦玉勇,王浩,等.土石混合体力学特性的颗粒离散元双轴试验模拟研究[J].岩石力学与工程学报,2015,34(增刊1): 3564 - 3573. (TIAN Hu-nan, JIAO Yu-yong, WANG Hao, et al. Research on biaxial test of mechanical characteristics on soil-rock aggregate (SRA) based on particle flow code simulation[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2015, 34(S1): 3564 - 3573. (in Chinese))
- [6] 韩洪兴,陈伟,邱子峰,等.考虑破碎的堆石料二维颗粒流数值模拟[J].岩土工程学报,2016,38(增刊2): 234 - 239. (HAN Hong-xing, CHEN Wei, QIU Zi-feng, et al. Numerical simulation of two-dimensional particle flow in broken rockfill materials[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2016, 38(S2): 234 - 239. (in Chinese))
- [7] 张家铭,邵晓,王霄龙,等.沉桩过程中钙质砂颗粒破碎特性模拟研究[J].岩土力学,2015,36(1): 272 - 278. (ZHANG Jia-ming, SHAO Xiao-quan, WANG Xiao-long, et al. Discrete element simulation of crushing behavior of calcareous sands during pile jacking[J]. Rock and Soil Mechanics, 2015, 36(1): 272 - 278. (in Chinese))
- [8] LIU S, WANG J. Depth-independent cone penetration

- mechanism by a discrete element method (DEM)-based stress normalization approach[J]. Canadian Geotechnical Journal, 2016, **53**(5): 871 – 883.
- [9] WANG J, LIU S, CHENG Y P. Role of normal boundary condition in interface shear test for the determination of skin friction along pile shaft[J]. Canadian Geotechnical Journal, 2017, **54**(9): 1245 – 1256.
- [10] 蒋明镜, 张伏光, 孙渝刚, 等. 不同胶结砂土力学特性及胶结破坏的离散元模拟[J]. 岩土工程学报, 2012, **34**(11): 1969 – 1976. (JIANG Ming-jing, ZHAGN Fu-guang, SUN Yu-gang, et al. DEM simulation of mechanical behaviour and bond breakage of different cemented sands[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2012, **34**(11): 1969 – 1976. (in Chinese))
- [11] 周 健, 张 津, 王强强. 石膏颗粒接触试验研究[J]. 同济大学学报: 自然科学版, 2016, **44**(1): 67 – 72. (ZHOU Jian, ZHANG Jin, WANG Qiang-qiang. Experimental study on contact of gypsum particles[J]. Journal of Tongji University: Natural Science, 2016, **44**(1): 67 – 72. (in Chinese))
- [12] 周伦伦, 楚锡华, 徐远杰. 基于离散元法的真三轴应力状态下砂土破碎行为研究[J]. 岩土工程学报, **39**(5): 839 – 847. (ZHOU Lun-lun, CHU Xi-hua, XU Yuan-jie. Breakage behavior of sand under true triaxial stress based on discrete element method[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, **39**(5): 839 – 847. (in Chinese))
- [13] WANG J, YAN H. On the role of particle breakage in the shear failure behavior of granular soils by DEM[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2011, **37**(8): 832 – 854.
- [14] LOBO-GUERRERO S, VALLEJO L E. DEM analysis of crushing around driven piles in granular materials[J]. Géotechnique, 2005, **55**(8): 617 – 623.
- [15] BEN-NUN O, EINAV I. The role of self-organization during confined comminution of granular materials[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2010, **368**(1910): 231 – 247.
- [16] McDOWELL G R, DE BONO J P. On the micro mechanics of one-dimensional normal compression[J]. Géotechnique, 2013, **63**(11): 895 – 908.
- [17] ZHOU W, YANG L, MA G, et al. Macro–micro responses of crushable granular materials in simulated true triaxial tests[J]. Granular Matter, 2015, **17**(4): 497 – 509.
- [18] HANLEY K J, O'SULLIVAN C, HUANG X. Particle-scale mechanics of sand crushing in compression and shearing using DEM[J]. Soils and Foundations, 2015, **55**(5): 1100 – 1112.
- [19] ZHOU W, LIU J, MA G, et al. Macroscopic and microscopic behaviors of granular materials under proportional strain path: a DEM study[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2016, **40**(18): 2450 – 2467.
- [20] NG C W W, CHOI C E, GOODWIN G R, et al. Interaction between dry granular flow and deflectors[J]. Landslides, 2017: 1 – 13.
- [21] O'SULLIVAN C. Advancing geomechanics using DEM[J]. Geomechanics From Micro to Macro, 2015: 21 – 32.
- [22] ZHOU B, WANG J, WANG H. A new probabilistic approach for predicting particle crushing in one-dimensional compression of granular soil[J]. Soils and Foundations, 2014, **54**(4): 833 – 844.
- [23] TSOUNGUI O, VALLET D, CHARMET J C. Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials[J]. Powder Technology, 1999, **105**(1): 190 – 198.
- [24] NAKATA A F L, HYDE M, HYODO H, et al. A probabilistic approach to sand particle crushing in the triaxial test[J]. Géotechnique, 1999, **49**(5): 567 – 583.
- [25] WANG W, COOP M R. An investigation of breakage behaviour of single sand particles using a high-speed microscope camera[J]. Géotechnique, 2016, **66**(12): 984 – 998.
- [26] ZHAO B, WANG J, COOP M R, et al. An investigation of single sand particle fracture using X-ray microtomography[J]. Géotechnique, 2015, **65**(8): 625 – 641.
- [27] HAGERTY M M, HITE D R, ULLRICH C R, et al. One-dimensional high-pressure compression of granular media[J]. Journal of Geotechnical Engineering, 1993, **119**(1): 1 – 18.
- [28] LINGS M L, DIETZ M. An improved direct shear apparatus for sand[J]. Géotechnique, 2004, **54**(4): 245 – 256.