

颗粒离散元法工程应用的三大问题探讨

刘 春^{1, 2}, 乐天呈¹, 施 斌¹, 朱 遥¹

(1. 南京大学 地球科学与工程学院, 江苏 南京 210023; 2. 南京大学(苏州)高新技术研究院, 江苏 苏州 215123)

摘要: 颗粒离散元法常用于岩土试样的宏微观特性研究。在模拟工程问题时, 需要用较大的单元来代表岩土块体, 并赋予相应的力学性质。颗粒离散元法的工程应用面临着三大问题: (1) 难以直接得到特定力学性质的堆积模型, 其建模困难; (2) 计算量巨大, 限制了大规模工程应用; (3) 多场和流固耦合理论以及软件还不完善。在分析这些问题本质和研究进展的基础上, 提出宏微观转换公式和自动训练方法来快速建模; 基于矩阵离散元算法来实现高性能的数值计算; 引入孔隙密度流法以实现快速的多场和流固耦合模拟。基于这些解决思路, 从零开始研发了高性能离散元软件 MatDEM, 实现了综合大变形、多场和流固耦合数值模拟。最后, 探讨了亟待解决的关键科学和技术问题。

关键词: 岩土工程; 离散元; 工程应用; MatDEM

中图分类号: TU 578

文献标识码: A

文章编号: 1000 - 6915(2020)06 - 1142 - 11

Discussion on three major problems of engineering application of the particle discrete element method

LIU Chun^{1, 2}, LE Tiancheng¹, SHI Bin¹, ZHU Yao¹

(1. School of Earth Sciences and Engineering, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu 210023, China;

2. Nanjing University(Suzhou) High-Tech Institute, Suzhou, Jiangsu 215123, China)

Abstract: The particle discrete element method (DEM) is generally used in the macro-micro investigations of rock and soil samples. In order to simulate engineering problems, it is necessary to use larger elements to represent the rock and soil masses and to assign corresponding mechanical properties. However, there are three problems in the application of the DEM: (1) it is difficult to directly get the packing model with specific mechanical properties, i.e. the modeling is difficult, (2) large-scale engineering applications are limited by the huge computational cost and (3) the multi-field and fluid-solid coupling theory and software are not perfect. On the basis of analyzing the essence and research progress of these problems, macro-micro conversion formulas and an automatic training method are proposed for fast modeling. High performance numerical calculations can be completed based on the matrix discrete element method and the pore density flow method is introduced to realize fast multi-field and fluid-solid coupling simulations. Based on these solutions, a high-performance discrete element software MatDEM was developed from scratch, and large deformation, multi-field and fluid-solid coupling numerical simulations were realized. Finally, key science and technology problems in the future researches were discussed.

Key words: geotechnical engineering; discrete element method; engineering application; MatDEM

收稿日期: 2019 - 10 - 28; **修回日期:** 2020 - 01 - 01

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(41761134089, 41977218); 江苏省自然科学基金资助项目(BK20170393)

Supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 41761134089 and 41977218) and Natural Science Foundation of Jiangsu Province (Grant No. BK20170393)

作者简介: 刘 春(1984 -), 男, 2012 年于南京大学大学地质工程专业获博士学位, 现任副教授、硕士生导师, 主要从事计算工程地质方面的研究工作。E-mail: chunliu@nju.edu.cn

DOI: 10.13722/j.cnki.jrme.2019.0977

1 引言

岩土体在宏观上表现为相对连续,而在微观上是由一系列的颗粒、孔隙和裂隙等组成的结构系统。岩土体的不均匀性、离散性和大变形破坏难以通过常规的基于连续介质力学的方法来分析。P. A. Cundall 和 O. D. L. Strack^[1]于 1979 年首次提出了离散元法(本文中指颗粒离散元法),这种方法基于牛顿运动定律,通过计算颗粒间的受力和运动,来分析和研究宏观材料的变形和破坏。通过 40 年的发展,离散元法在地质、岩土、化工、环境和矿冶等领域取得了广泛的应用^[2-3]。

离散元法通过堆积和胶结特定力学性质的颗粒来近似模拟岩石和土体,能天然地表征岩土体的各类微观结构和力学特性。近年来,岩土领域研究逐渐向着精细化(微观机制)和复杂化(如多场耦合)发展。离散元宏微观研究已经取得巨大的发展,逐渐建立起了各类岩土体材料的离散元模型,如碎石、黏性土和土石混合物^[4-5],并用于岩土体的液化作用^[6],蠕变过程^[7-8],岩石的应变局部化问题^[9]和脆性韧性转变^[10]等的研究。其中, M. J. Jiang 等^[11-13]提出了完整接触模型,充分地考虑了胶结的主要接触作用,对岩土体宏微观机制研究产生了深远的影响。离散元法已初步应用于工程领域各类复杂现象的机制研究,如砂土管涌^[14],盾构隧道土压力^[15],岩石碎屑流^[16]和库岸滑坡涌浪^[17],滑坡的形成过程^[18]及其动力学机制^[19],碎屑流冲击柔性网^[20],以及“深空”,“深地”,“深海”岩土工程^[21]等。

近十多年来,随着计算能力的提高和应用需求的增加,离散元软件得到了迅速的发展。例如,国际离散元商业软件 PFC 和 EDEM,开源软件 Yade, ESyS-Particle 和 LIGGGHTS 等,均取得较为广泛的应用。商业离散元软件使用较为简便,能够迅速地投入应用,通常相对昂贵。开源软件促进了离散元研究的迅速发展,但存在着使用门槛较高、代码臃肿和更新维护愈加困难等问题。近几年,开源软件也逐渐向半商业化(咨询服务)和商业化发展(商业软件)。通过十多年的发展,国内已有多款优秀的离散元软件,例如:中国科学院非连续介质力学与工程灾害联合实验室与北京极道成然科技有限公司联合开发了 GDEM 软件,实现了从连续变形到破裂运动的全过程模拟,软件已成功商业化,并在工程实践中得到了很好的应用^[22],特别是提出了原创的渗流弹簧元法和孔隙-裂隙耦合渗流中心型有限体

法,在滑坡多场耦合灾害分析和评价方面取得了一系列重要的创新成果^[23]。大连理工大学颗粒材料计算力学课题组开发的 SDEM 是一款基于 GPU 并行运算的颗粒离散元计算分析软件^[24],其能够兼容 DEM-FEM、扩展多面体单元和超二次曲面单元,可对海冰、岩石等脆性材料的破坏过程进行有效的模拟。

随着岩石力学和岩土工程等领域研究和应用需求的不断精细化和复杂化,以及离散元法理论和数值计算软件的发展,可以预见,在未来十年,离散元法将在工程领域迎来巨大的发展机遇和应用前景。但总体来说,目前颗粒离散元法还主要用于学术研究,在工程中的大规模应用还相对较少。颗粒离散元法应用于工程实践还面临着以下三大问题:

(1) 离散元堆积模型的宏观力学性质与单元力学参数间的关系不明确,难以直接获得特定力学性质的模型,定量建模困难。(2) 离散元法通过迭代计算完成模拟,其计算量巨大,岩土领域的商业颗粒离散元软件的计算单元数通常在 10 万单元以内,极大地限制了其工程应用。(3) 现代工程中常常面临着多场和流固耦合问题,而离散元法的相关理论未完善,相应的数值计算软件也正在发展中。

本文将从离散元法工程应用可行性出发,探讨离散元法走向工程应用面临的三大问题的本质和研究进展,并提出了初步的解决方案:离散元宏微观转换理论和自动训练方法、高性能的矩阵离散元算法和离散元孔隙密度流方法。基于这些理论研究,笔者从零开始研发了高性能离散元软件 MatDEM(矩阵离散元),实现了快速量化建模,支持数百万单元的离散元数值模拟,以及多场和流固耦合数值模拟。软件可由网站下载 <http://matdem.com>,通过共享和二次开发,以完成工程尺度的各类离散元数值分析。

2 离散元法的计算尺度和工程应用可行性

离散元法的基本思想起源于分子动力学,并与分子动力学模拟具有类似的特征^[25]。在原子尺度上,原子间仅存在简单的法向引力和斥力,而不存在切向力(摩擦力)等的作用。在更大的尺度上,原子(或颗粒)间由于黏附和啮合等作用而能承受切向力,并产生摩擦作用,以及各类复杂的力学特性。

在离散元法中,岩土体由一系列的颗粒堆积和胶结而成。同样的,由一系列光滑的玻璃球胶结而

成材料的表面具有一定摩擦因数。因此,岩土体等颗粒聚合体在不同尺度上具有不同的力学特性。例如:石英具有很高的强度,而石英颗粒堆积和胶结而成的石英砂岩则强度相对较低^[9],且不同的石英砂岩的力学性质也存在着较大差异。这是由于不同的颗粒堆积方式和堆积密度、颗粒级配和形态、胶结强度、微裂隙的含量和分布等,均会对岩石的力学性质有所影响,而离散元法可以有效地模拟这种多尺度的特性,并被广泛地应用于认识岩土体宏观力学特性的微观机制^[21],也就是宏微观机制研究。

颗粒通过简单的胶结和特定的堆积能够在宏观上表现出各种力学性质,如弹性、弹塑性和各向异性等,以及可实现剪胀和剪缩等过程模拟^[26]。从理论上说,如果把大量简单的颗粒按特定的方式堆积和胶结起来,可以模拟岩土体各类复杂的变形和破坏过程。但是,这在大尺度的离散元数值模拟中还存在着困难。当颗粒直径为1 mm时,1 m³空间内的颗粒数量会达到10亿量级。在更大的工程尺度上,其需要的单元数更是巨大。而目前通常的离散元数值模拟的单元数还在几万到几百万的量级。因此,离散元数值模拟研究还集中在试样尺度上。

在离散元数值模拟中,需要考虑和处理模拟尺度和单元数量的问题。物质在不同尺度上均存在着不连续性和特定的结构。在宏观尺度上,岩体中存在节理等结构面;细观上,岩石颗粒间存在着微裂隙;即使对于岩石中的一个颗粒,它内部仍然存在着微小的裂隙和孔隙结构,并可能形成颗粒的非线性力学特征;在原子尺度上,由于晶格的缺陷,在受力时产生位错,并可能在宏观上表现为材料的蠕变^[27]。显然,任何分析方法和数值模拟都无法精细地考虑细观上的所有属性和结构。在有限元法等连续介质力学方法中,通过网格划分,用一个单元来代表相应区域的岩土块体,并赋以力学性质。由于更小尺度上的物质组成和结构作用等因素,这一块体的力学性质并不一定是完全弹性的。因此,在有限元法中,需要为基本单元定义不同的本构模型,以综合描述和反映更小尺度上的因素,及其造成的力学性质的变化。

对于试样尺度的离散元数值模拟,可采用一个单元代表真实岩石的一个颗粒,并通过研究单元的接触模型,探索岩石宏观变形和破坏的微观机制。而对于工程尺度的问题,如滑坡的离散元模拟,目前仍然无法模拟岩石中的每个颗粒。此时,与有限元法类似,每个离散单元可代表着一个岩块,并需要赋以相应的接触模型和力学性质。所以,在进行

大尺度的离散元数值模拟时,需要确定好单元的尺寸,并设定在这个尺寸下,离散单元应当具有的力学性质。

在地质领域,离散元法已被广泛地应用于构造演化过程的数值模拟^[28]。由于岩体中存在节理裂隙,其力学性质通常会比小块的岩石弱。因此,在构建大尺度的离散元模型时,单元间的连接通常会被赋以相对较小的模量和强度,以表征相应岩体的综合力学性质。传统的构造演化离散元数值模拟通常还是定性的,而工程上需要定量化和更高精度的数值模拟,即需要解决定量化建模和计算量的问题。

3 三大问题的认识和解决方案

3.1 离散元法的定量化建模问题

连续介质力学方法通过建立宏观本构方程来描述模拟材料的力学性质。例如,在有限元法中,通过设定宏观力学性质(如杨氏模量和泊松比)即可得到所需数值模型。而离散元法通过堆积特定力学性质的颗粒来建模,模型宏观力学性质受复杂的颗粒性质,堆积过程和胶结情况的影响。这一复杂性使得离散元能够用于探索岩土体宏观变形破坏的微观本源,但是也给离散元的定量化建模带来困难和不确定性。离散元建模存在着不确定性和多解性:(1)通常无法直接得到具有特定力学性质的离散元模型;(2)与宏观力学性质对应的颗粒堆积模型通常不是唯一的。

第一个特性涉及如何建立具有特定力学性质的离散元堆积模型。离散堆积模型的力学性质受堆积结构和胶结情况(裂隙)的影响。离散元数值模拟表明:同一组颗粒重新堆积和胶结后,其力学性质会有所变化;而岩石中的裂隙和节理对其整体力学性质有较大影响。当堆积结构确定且胶结完整时,模型的力学性质主要受单元的接触模型及其参数控制。在C. Liu等^[29-30]中,给出了紧密规则堆积离散元模型宏微观力学参数的转换公式。对于线弹性模型,应用转换公式,模型中5个颗粒间力学参数,正向刚度(K_n)、切向刚度(K_s)、断裂位移(X_b)、初始抗剪力(F_{s0})和摩擦系数(μ_p),可以由材料的5个宏观力学性质计算得到,包括杨氏模量(E)、泊松比(ν)、抗压强度(C_0)、抗拉强度(T_0)和内摩擦系数(μ_i)。转换公式揭示了这5个常规宏观力学性质与颗粒间力学参数间的关系(见附录)。结合转换公式,以及数值测试和自动调整,可自动训练具有特定力学性质的离散元模型。

第二个特性涉及岩土体的结构性研究。真实世界中，两块不同颗粒组成和胶结强度的岩块可能具有很相近的力学性质。在岩石的单轴压缩和拉伸试验中，多块同种岩石也可能有多种不同的具体破坏形态，即使它们的测试强度非常接近^[31]。离散元法通过模拟岩土体的天然堆积和胶结来建模，由于岩土体内部存在着一定结构，使得离散元建模也存在着不确定性和多解性。例如，利用离散元法堆积、胶结和调节，得到一个测试抗拉强度为 T 离散元模型。此时，在模型中增加节理或随机微裂隙(降低强度)，并适当增加单元间胶结的抗拉力(提高强度)，可以得到具有相同抗拉强度的模型。

离散元建模天然保留了岩土体的结构性和复杂性。在岩土体的宏观研究中，需要精细地考虑颗粒堆积方式、接触模型和胶结情况等，并且控制某一因素的变化来探究岩土体宏观变形破坏的微观机制。这类研究通常为试验和试样尺度的。对于更大的工程尺度的数值模拟，通常笔者所关心的是数值模型在特定应力作用下的变形和破坏，即堆积模型是否具有特定的弹性模量和强度，而不在乎岩石宏观力学性质的内在机制和破坏模式。这种情况下，可以通过堆积、胶结和测试调整来建立特定力学性质的离散元堆积材料，并应用于离散元的量化建模。

常规的颗粒离散元建模依赖于反复的单元参数调整和宏观力学性质测试操作，以获得特定力学性质的离散元堆积模型。调整操作通常需要一定的经验，并且测试过程较为繁琐耗时。基于转换公式^[29-30]，MatDEM 软件实现了离散元材料的自动训练。用户输入所需材料的基本力学性质，包括杨氏模量、泊松比、抗拉强度、抗压强度和内摩擦系数，即可通过 4~6 次的自动测试和调整，获得具有指定力学性质的离散元堆积体。输入相关力学性质后，软件可在 0.5 h 内自动完成这些调整和测试操作，极大地降低了离散元法建模的难度。目前，这种方法仅限于线弹性模型，对于塑性和蠕变等特性，还需要研究相应的接触模型，以及宏微观参数的转换公式和训练方法。

接触模型和宏微观分析是离散元研究和应用非常重要的基础，其能从本质上探求岩土材料复杂宏观特性的微细观机制。进一步，在计算机中制造出符合真实岩土体性质的离散元模型，并应用于复杂问题的分析，特别是难以通过实验深入分析的科学与工程问题。这一方面已有大量的前人研究成果，

具体可参考蒋明镜^[21]。

3.2 矩阵离散元算法和高性能计算

(1) 矩阵离散元算法

离散元数值计算基于时间步迭代^[32]，在每个时间步中，计算每个单元受到邻居单元的合力；然后，基于牛顿运动定律，计算单元的加速度、速度和位移；通过不断的迭代计算，实现颗粒系统的动态模拟。由于每个单元的邻居单元数不同，且会随着单元的运动而变化。在常规的离散元计算中，需要将邻居单元编号存在链表中，并通过两层的循环计算来获得所有单元受到的合力。因此，其运算操作非常多，计算量巨大。邻居矩阵和接触矩阵如图 1 所示。

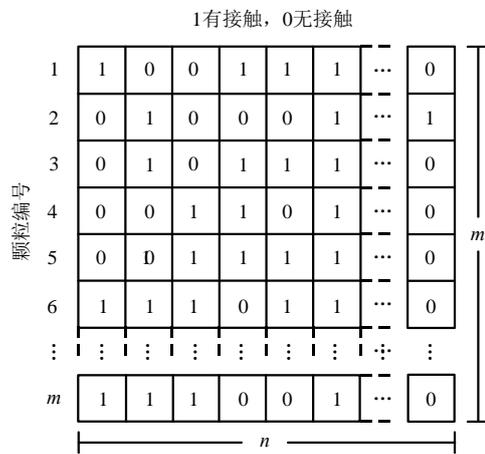
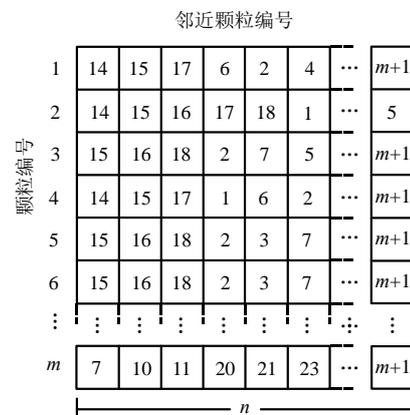


图 1 邻居矩阵和接触矩阵

Fig.1 Neighbor matrix N and contact matrix B_c .

针对这个问题，提出了矩阵离散元算法，通过使用这个方法，可以一次性计算所有单元间的受力和运动，而不需要循环操作。其基本思想如下：
 ① 引入虚单元。将普通单元从 1 到 m 顺序编号，最后添加一个虚单元，其编号为 $m+1$ ；与单元编号对应，再建立单元各个属性的数组，如坐标 X, Y, Z 分量等；
 ② 建立邻居矩阵。计算每个单元的邻居

单元(距离小于一定值的单元), 并将其编号逐行存储于邻居矩阵 N 中。如图 1(a)所示, 在这个矩阵, 其第一行记录了第 1 个单元的邻居单元编号, 包括 14, 15, 17 等单元。由于单元的邻居单元数量通常不一致, 邻居矩阵中长短不一的位置用虚单元编号 $m+1$ 填充。③ 邻居矩阵记录了单元间的连接关系, 在获得邻居矩阵的基础上, 可以建立一系列与邻居矩阵相同大小的矩阵, 并用于记录单元与其邻居间连接的属性。例如, 可以通过接触矩阵(B_c)来记录单元间是否有接触力, 当其值为 1(true)时, 说明两单元相互接触。如图 1(a)所示, 邻居矩阵 N 的第 1 个值为 14, 而图 1(b)中 B_c 矩阵的第一个值为 1, 而说明第 1 个单元和第 14 个单元处于接触状态; ④ 最后, 通过矩阵计算来获得单元间受力^[29]。

例如, 令 K_n 为单元与其邻居间连接的正向刚度矩阵, X_n 为相应的正向相对位移矩阵(即重叠量), 那么二者相乘即可得到初步的正向受力矩阵(F_{n0}):

$$F_{n0} = K_n \cdot X_n \quad (1)$$

式中: *符号代表矩阵元素逐项相乘。由于单元与其邻居单元间可能不存在接触力, 需要将 F_{n0} 再点乘 B_c 矩阵, 得到单元间实际的正向受力矩阵 F_n :

$$F_n = F_{n0} \cdot B_c \quad (2)$$

注意到, 式(1)和(2)中的参数均为二维矩阵, 并与邻居矩阵对应。 F_n 矩阵逐行记录了单元与其邻居单元间的正向作用力。最后, 对 F_n 矩阵在水平方向上取和, 即得到单元的合力数组。

通过定义虚单元来生成离散元的邻居单元, 可以实现完全矩阵的离散元法求解计算。基于这一方法, 笔者研发了高性能离散元软件 MatDEM, 其实现了数百万颗粒的离散元数值模拟, 通过高性能的 GPU 计算, 较好地解决了计算量的问题。

(2) GPU 高性能计算

近年来的研究表明, 基于 GPU(图形处理器)的高性能计算技术能有效地提高科学计算的速度, 其已在分子动力学、石油勘探、计算力学、材料科学和人工智能等领域取得了广泛的应用, 能够提高 8~30 倍的数值计算效率^[33]。通常的独立显卡即包含 GPU 计算核心, 如 NVIDIA 的独立显卡通常有几百个 cuda 计算核心。对于专业 Tesla GPU, 如 P100, V100, 其计算核心达数千个, 总计算效率能达到单个 CPU 核的数十倍。

GPU 特别适用于海量的矩阵计算, 采用上述的矩阵离散元算法可实现离散元法的完全矩阵计算, 通过直接调用 cuda 的矩阵计算库, 完成高速的

离散元法计算。同时, GPU 计算依赖于 CPU 的控制, 通过完全矩阵计算, 可以最大化地减少二者之间的通信, 从而进一步提高计算效率。图 2(a)给出了在一台普通笔记本上(ThinkPad T470), MatDEM 的 CPU 和 GPU 计算的速度对比曲线。可以看到, 当单元数量较少时, GPU 计算速度低于 CPU 计算速度。此时, 主要的计算时间耗费在二者间的通信上。而随着单元数的增加, GPU 计算速度迅速提高。当颗粒数量多于 1 万个时, GPU 计算速度显著高于 CPU; 在单元数为 10 万时, 其速度约为 100 万次/s 单元运动计算, 达到 CPU 计算速度的 5 倍。图 2(b)为在 MatDEM 在专业 GPU 服务器上的速度测试结果(Tesla P100 GPU, Intel Xeon E5-2637v4 CPU)。当单元数到 100 万时, GPU 计算速度达到 CPU 的约 50 倍。可以看到, 离散元法的矩阵计算能有效地提高离散元分析的计算效率, 并实现数百万单元的离散元数值模拟。

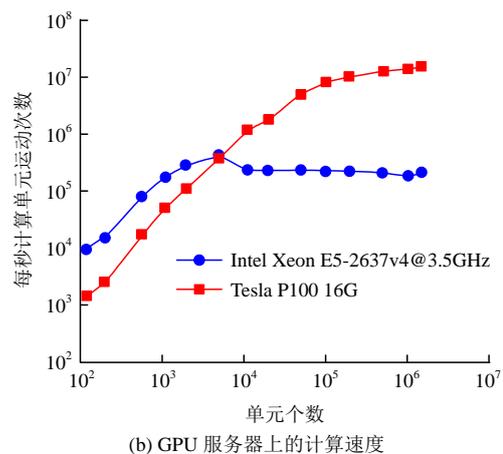
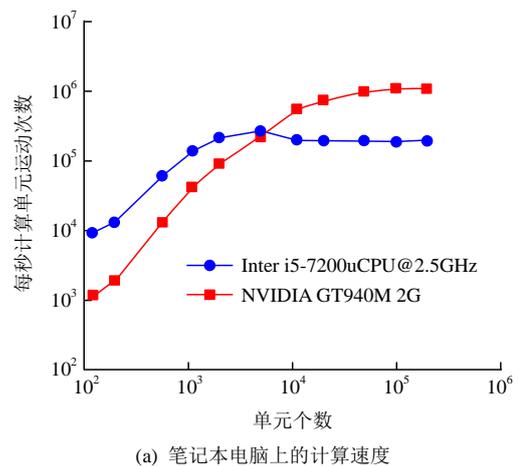


图 2 不同单元数时 MatDEM 的计算速度
Fig.2 Computation speed of MatDEM with different numbers of elements

3.3 基于离散元法的多场和流固耦合

大量的地质和岩土工程问题涉及到多场耦合

和流固耦合问题，如水力压裂、隧道突水突泥、库岸滑坡失稳过程。常规的渗流场计算主要是针对宏观的连续介质，通过有限差分等方法来模拟渗流^[23]。在微观尺度上，岩土体由颗粒、孔隙和孔隙中的流体组成，又构成了流固耦合问题。多场耦合和流固耦合已成为岩石力学与工程研究的热点和难点，在初步解决离散元法建模和计算量问题的基础上，实现离散元法的多场和流固耦合数值模拟是工程应用的关键。

(1) 离散元法多场耦合思想

在利用有限元法研究宏观的多场耦合问题时，用一个单元代表岩土体颗粒和孔隙的结合体，将渗流压力等各种场的作用等效到有限单元上。同样的，在利用颗粒离散元法模拟较为宏观的问题时，可以令一个单元代表若干孔隙和颗粒组成的结合体，并具有含水量和温度等性质，即可在单元间应用差分计算实现渗流场、温度场等的数值模拟。这种思想已经应用于多场作用下土体失水开裂的数值模拟^[34]：将水分场添加到单元上，使单元具有含水量属性；当土层表面蒸发的时候，其含水量发生变化；在单元间通过差分计算的思想来获得两个非饱和单元间的渗流量(dM_{12})^[34]：

$$dM_{12} = \alpha_w (\omega_2 - \omega_1) A dt \quad (3)$$

式中： α_w 为单元间水分扩散率， ω_1 和 ω_2 为两接触单元的含水量， A 为单元间接触面积， dt 为时间步。

进一步，建立土层单元强度、半径等属性与含水量的关系，当含水量降低时，单元强度提高，半径减小，从而实现土的蒸发失水和开裂过程模拟^[34]。同样的，通过定义每个单元的温度，以及单元间的热传导系数，可利用差分法实现颗粒间的热传导数值模拟。需要注意的是，类似于离散元材料的力学性质，其热传导性质也存在着宏观和微观的区别和联系，并有待于深入的研究。

离散元法可以方便地利用有效应力原理来计算水压力的作用：将水的浮力作用到每个单元上，并实现水位变化对土层变形影响的模拟。这种方法已应用于地面沉降过程和地裂缝的数值模拟^[35]：在水位面以下的单元受水的浮力的作用，当地下水位下降时，相应单元所受到的体力增加，使得单元间作用力增加，并导致单元应变增加和宏观上的土层沉降。

离散元系统中热量的产生包括 3 个方面^[30]：

- ① 由于单元阻尼力的作用产生的阻尼热；
- ② 由于单元间连接断裂产生的断裂热；
- ③ 以及单元表面相

互摩擦产生的摩擦热。通过统计和累积每个单元上热量的产生，在 MatDEM 软件中实现了离散元系统热量计算和能量守恒数值模拟。图 3 给出了滑坡摩擦生热模拟结果^[36]，通过精确的热量计算，可得到滑坡过程中滑带温度的变化。而土体的抗剪强度与温度相关，热量和温度的计算有利于研究高速远程滑坡的形成机制。图 4 为能源桩热力耦合数值模拟结果，能源桩温度较高，并向土体传递热量，土体受热膨胀，模拟了热传导和热力耦合过程。这些示例代码均已在软件中共享，用于分析复杂的多场耦合问题。

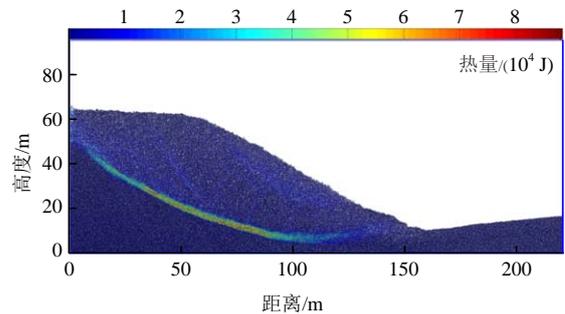


图 3 MatDEM 滑坡数值模拟摩擦热分布图^[36]

Fig.3 Distribution of frictional heat in the numerical simulation of a landslide using MatDEM^[36]

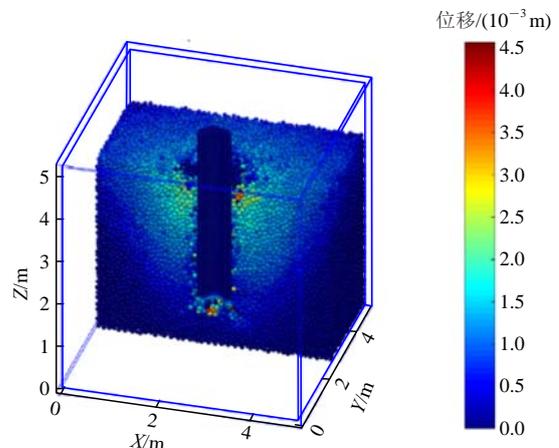


图 4 能源桩热力耦合数值模拟位移场分布图

Fig.4 Displacement field in the thermal-mechanical coupling numerical simulation of an energy pile using MatDEM

(2) 离散元流固耦合方法和趋势

目前，离散元流固耦合的方法主要有 DEM-CFD^[37-39]、DEM-LBM^[40-41]和 DEM-SPH^[42]等。其中，DEM-CFD 耦合方法较为成熟，国际商业软件 EDEM 和 PFC 均包含 DEM-CFD 耦合功能；基于开源代码 LIGGGHTS(固体)和 OpenFoam(流体)，CFDEM 软件也实现了 DEM-CFD 耦合模拟。其求解计算通常采用不完全求解方法，流体计算网格尺寸大于固体颗粒的直径，数值计算的成本较低^[43]，

适用于较大规模的宏观三维流固耦合数值模拟，如流化床模拟^[44]，滑坡涌浪模拟^[45]。

光滑质点流体动力学(简称 SPH)的基本思想是将连续的介质用相互作用的质点组来描述，能够较好地处理界面问题，已经广泛应用于工程计算分析研究中^[46]。DEM-SPH 耦合在自由表面流体中流固相互作用等问题上具有优势。在 DEM-SPH 方法里，流体的分辨率至少需要固体颗粒粒径的两倍^[47]，其计算量相对较大，同时在稳定性和精度上还有所欠缺^[48]。

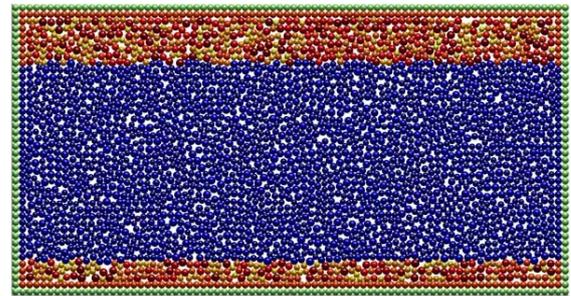
在 DEM-LBM 固液耦合中，将每一个离散元颗粒视为流体中的运动物体，其形状和大小通过 LBM 格子来描述，并计算颗粒和流体之间的作用力^[40]。这种方法已经在颗粒流动，孔隙流体^[41]，震动过程砂土液化^[49]等模拟中得到应用，展现出了非常真实的流固耦合效果。LBM 法非常适用于多相多组分流体模拟，DEM-LBM 能够精确模拟复杂多场、多相和多尺度的问题，具有非常好的应用前景。但是这种方法计算量巨大，目前三维 DEM-LBM 耦合模拟通常仅限于数百个颗粒^[41]。

法国开源软件 Yade 团队在 DEM-LBM 方面开展了多年的工作，并在 Yade 代码中集成了 DEM-LBM 耦合模块。由于计算量巨大，其主要用于实验尺度的机制研究。为满足大尺度的流固耦合计算需求，近年 C. Yuan 和 B. Chareyre^[50]也开始发展基于孔隙网络模型的流固耦合数值模拟。这种方法的基本思想是：① 在离散元颗粒堆积模型中区分出孔隙和孔喉通道；② 孔隙中的流体通过孔喉来运移，其渗流量由岩土体性质、孔隙间的压力差和孔喉直径等确定；③ 根据孔隙的体应变和体积模量来确定孔隙水压力；④ 孔隙水压力作用于颗粒单元上，使其运动，并改变孔隙的体积，从而实现流固耦合作用。这种方法的优点是计算速度快，但是仅限于孔隙系统的流固耦合模拟，如岩石的水力压裂模拟^[50]。

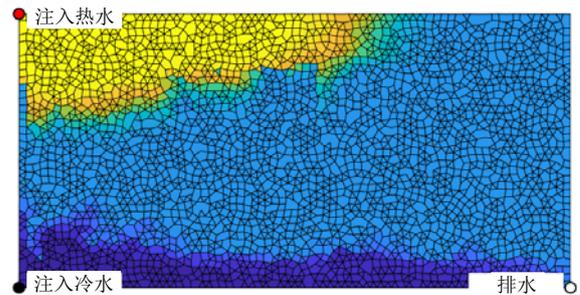
从本质上看，LBM 数值模拟是一定密度的流体在网格节点间运移，并由密度来确定水压力等宏观参数。在 MatDEM 软件中，综合 LBM 密度流体的思想和孔隙网络模型，采用孔隙密度流的方法来实现流固耦合。由于流体的压力是其密度和温度的函数，在以上第 3 步中，笔者根据孔隙中流体的质量和体积得到其密度，并由流体密度和温度得到孔隙流体的压力。采用这种改进的方法，可以同时考虑流体运移和温度变化对孔隙水压力的作用。

基于这种方法，MatDEM 已实现了溶质运移、

多场和流固耦合数值模拟。软件已用于地下冷热水迁移混合过程模拟。图 5(a)为颗粒堆积模型，通过连接相邻颗粒的中心点，可以定义一系列的孔隙流域，构成图 5(b)的流域网络。模型分上中下 3 层，中层渗透系数低。在模型的左上角和左下角分别注入热水和冷水，右下角排水。从图 5(b)可以看到，冷水沿着下透水层逐渐向右运移，“推动”原有水体，并使水温下降；而左上角注入的热水则沿着上透水层运移，同时也向中间的弱透水层渗流(见图 5(b))。



(a) 离散单元堆积模型

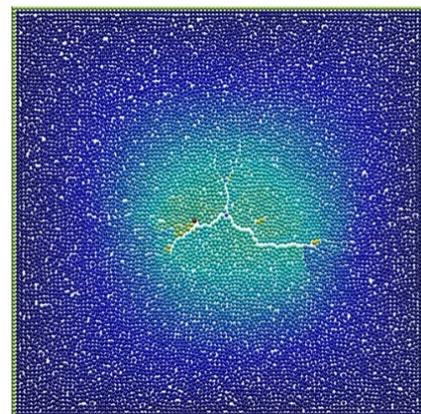


(b) 模型流域的温度场

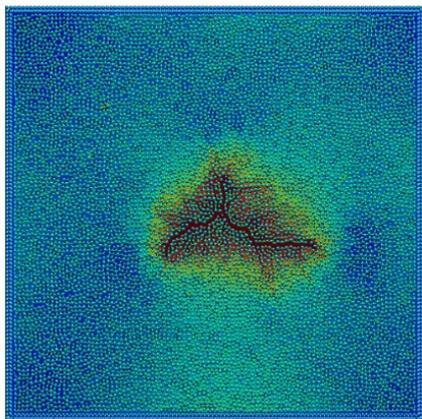
图 5 MatDEM 水热耦合数值模拟

Fig.5 Hydro-thermal coupling numerical simulation by using MatDEM

图 6 为水力压裂数值模拟结果。这个模型采用各向同性砂岩的力学性质，四周边界固定，在其中施加恒定的 100 MPa 水压力，并持续 0.002 s，产生了近 120° 夹角的 3 条微裂隙。可以看到，MatDEM



(a) 位移场



(b) 孔隙水压力场

图 6 MatDEM 水力压裂数值模拟结果

Fig.6 Result of numerical simulation of hydraulic fracturing by using MatDEM

较好地实现了水力压裂(见图 6(a)), 以及水在孔隙和裂隙系统中的扩散模拟(见图 6(b))。限于本文主题和篇幅, 在此不作深入介绍。

4 结论和展望

离散元法模拟真实岩土体的组成方式, 通过简单的颗粒单元堆积和胶结来建模, 并自然地产生岩土体的各类复杂的宏观性质。这一特性使得离散元法被广泛地应用于试样尺度的岩土体的宏微观特性研究。在工程尺度上, 需要用一个离散单元来代表相应大小的岩土块体, 并将这个岩土块体的力学性质赋给单元, 从而实现大尺度的离散元模拟, 如滑坡和地面沉降过程。

离散元法工程应用的三大问题可以总结为理论上的建模问题、技术上的计算效率问题和应用中的多场耦合问题。建模问题的目标是要在计算机中制造出符合真实岩土体力学性质的离散元堆积体, 相应的接触模型和参数选取问题一直是国内外研究的热点和难点。自动训练方法可以显著地降低建模的难度, 提高建模的效率。本文中介绍的转换公式仅限于线弹性接触模型的自动训练, 对于复杂的接触模型, 还亟待深入研究, 包括研究相应的转换公式, 以及结合自动训练和人工智能的建模方法。

矩阵离散元算法显著地提高了离散元软件的计算效率。目前, MatDEM 在单个 GPU(Tesla V100)上可模拟约 300 万单元, 对于 50~100 万单元的数值模拟(如滑坡), 通常需要几个小时至几天的计算时间。对于更大规模数值模拟, 则需要做多 GPU 并行计算。离散元法并行计算的基本思想是将

分析区域分解为一系列的块体, 将每一块体的求解计算分配到各个 GPU(或 CPU)中。同时, 在每一步迭代时, 需要交换相邻块体接触单元的受力等信息。在矩阵离散元算法中, 每个单元的接触信息均存储在矩阵相应的行上, 通过进一步的矩阵分割操作, 可实现大规模的离散元多 GPU 并行计算。

MatDEM 包含基于孔隙网络模型的流固耦合方法, 这种方法虽然具有较高的计算效率, 但其应用范围具有一定的局限性。进一步, 需要研发 DEM-LBM 等的耦合, 以模拟岩土体复杂的流固耦合作用。由于巨大的计算量, 这种方法的大规模工程应用还依赖于算法计算效率的显著提升。

同时, 与固体单元的类似, 流体在孔隙中运移也面临着参数选取的问题, 即如何根据宏观的渗透系数来确定流体运移的相关参数。例如, 在基于孔隙网络模型的流固耦合方法中, 如何确定不同材料在不同压力作用下孔喉的渗透系数, 这还需要大量的理论研究和试验验证。同样的, 在做热传导数值模拟时, 也需要开展相应的宏微观转换和自动训练研究, 并在计算机中制造出符合真实岩土体性质的离散元数值模型。

离散元法理论研究、系统研发和工程应用是一条非常漫长和艰辛的道路。MatDEM 软件的研发历时逾十年, 总体可以分为以下几个阶段: (1) 方法测试阶段(2007~2010 年)。开展离散元程序算法测试研究; (2) 理论研究和软件框架设计阶段(2011~2013 年)。提出了矩阵离散元算法和宏微观转换公式^[30], 软件实现了 GPU 矩阵计算, 显著提高了计算效率; (3) 功能拓展和完善阶段(2014~2016 年)。软件实现离散元热量计算和多场耦合模拟, 建立起商业软件级别的完善后处理模块; (4) 通用化和应用阶段(2017~)。在中国科学技术协会和中国岩石力学与工程学会的支持下, 软件开始向通用化和工程应用方向发展。

通过近几年的持续研发, MatDEM 软件综合了前处理、计算、后处理和强大的二次开发, 可快速地开展各类地质和岩土工程问题的高性能离散元数值分析, 并通过二次开发封装新的专业离散元软件。目前, 软件已应用于滑坡、地面沉降、撞击破坏、桩土作用、滚刀破岩和水力压裂等一系列问题的模拟。进一步, 通过共享和合作研发, 逐步形成一系列拥有自主知识产权的岩土离散元软件, 并为国家“深地”和“深海”战略、地质灾害防治和川藏铁路建设提供高效的数值模拟仿真技术支持。

参考文献(References):

- [1] CUNDALL P A, STRACK O D L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. *Geotechnique*, 1980, 30(3): 331 - 336.
- [2] 徐佩华, 黄润秋, 邓辉. 颗粒离散元法的颗粒碎裂研究进展[J]. *工程地质学报*, 2012, 20(3): 410 - 418.(XU Peihua, HUANG Runqiu, DENG Hui. Advances in fractures of particles with distinct element method[J]. *Journal of Engineering Geology*, 2012, 20(3): 410 - 418.(in Chinese))
- [3] 宁晓斌, 孙新明, 余妮妮, 等. 搅拌磨 DEM-CFD 耦合仿真研究及搅拌器强度分析[J]. *有色金属工程*, 2016, 6(4): 63 - 67.(NING Xiaobin, SUN Xinming, SHE Yuni, et al. Research of multidisciplinary coupling simulation of the vertical stirred mill based on DEM-CFD and analysis of the screw agitator structural strength[J]. *Nonferrous Metals Engineering*, 2016, 6(4): 63 - 67.(in Chinese))
- [4] 周博, 汪华斌, 赵文锋, 等. 黏性材料细观与宏观力学参数相关性研究[J]. *岩土力学*, 2012, 33(10): 3 171 - 3 178.(ZHOU Bo, WANG Huabin, ZHAO Wenfang, et al. Analysis of relationship between particle mesoscopic and macroscopic mechanical parameters of cohesive materials[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2012, 33(10): 3 171 - 3 178. (in Chinese))
- [5] 焦玉勇, 王浩, 马江锋. 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 1): 3 564 - 3 573.(JIAO Yuyong, WANG Hao, MA Jiangfeng. 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(Supp.1): 3 564 - 3 573.(in Chinese))
- [6] 周健, 杨永香, 刘洋, 等. 循环荷载下砂土液化特性颗粒流数值模拟[J]. *岩土力学*, 2009, 30(4): 1 083 - 1 088.(ZHOU Jian, YANG Yongxinag, LIU Yang, et al. Numerical modeling of sand liquefaction behavior under cyclic loading[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2009, 30(4): 1 083 - 1 088.(in Chinese))
- [7] 张学朋, 王刚, 蒋宇静, 等. 基于颗粒离散元模型的花岗岩压缩试验模拟研究[J]. *岩土力学*, 2014, 35(增 1): 99 - 105.(ZHANG Xuepeng, WANG Gang, JIANG Yujing, et al. Simulation research on granite compression test based on particle discrete element model[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2014, 35(Supp.1): 99 - 105.(in Chinese))
- [8] KWOK C Y, BOLTON M D. DEM Simulations of soil creep due to particle crushing[J]. *Géotechnique*, 2013, 63(16): 1 365 - 1 376.
- [9] LIU C, POLLARD D D, KAI G, et al. Mechanism of formation of wiggly compaction bands in porous sandstone. Numerical simulation using discrete element method[J]. *Journal of Geophysical Research Solid Earth*, 2015, 120(12): 8 153 - 8 168.
- [10] AHARONOV E, SCHOLZ C H. The Brittle-Ductile transition predicted by a physics-based friction Law[J]. *Journal of Geophysical Research Solid Earth*, 2019, 124(4): 2 721 - 2 737.
- [11] JIANG M J, LEROUEIL S, KONRAD J M. Insight into shear strength functions of unsaturated granulates by DEM analyses[J]. *Computers and Geotechnics*, 2004, 31(6): 473 - 489.
- [12] JIANG M J, YU H S, HARRIS D. A novel discrete model for granular material incorporating rolling resistance[J]. *Computers and Geotechnics*, 2005, 32(5): 340 - 357.
- [13] JIANG M J, YU H S, HARRIS D. Bond rolling resistance and its effect on yielding of bonded granulates by DEM analyses[J]. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2006, 30(8): 723 - 761.
- [14] 周健, 周凯敏, 姚志雄, 等. 砂土管涌-滤层防治的离散元数值模拟[J]. *水利学报*, 2010, 41(1): 17 - 24.(ZHOU Jian, ZHOU Kaimin, YAO Zhixiong, et al. Numerical simulation of piping-filter prevention in sandy soil by discrete element method[J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2010, 41(1): 17 - 24.(in Chinese))
- [15] 蒋明镜, 王富周, 朱合华, 等. 考虑尾隙的盾构隧道土压力离散元数值分析[J]. *地下空间与工程学报*, 2010, 6(1): 28 - 32.(JIANG Mingjing, WANG Fuzhou, ZHU Hehua, et al. Numerical simulation on earth pressure for shield tunnels incorporating tail gaps by DEM[J]. *Chinese Journal of Underground Space and Engineering*, 2010, 6(1): 28 - 32.(in Chinese))
- [16] 李祥龙, 唐辉明, 熊承仁, 等. 岩石碎屑流运移堆积过程数值模拟[J]. *工程地质学报*, 2011, 19(2): 168 - 175.(LI Xianglong, TANG Huiming, XIONG Chengren, et al. Numerical simulation of flow and deposition process of rock avalanche[J]. *Journal of Engineering Geology*, 2011, 19(2): 168 - 175.(in Chinese))
- [17] 赵兰浩, 侯世超, 毛佳. 库区滑坡涌浪数值模拟方法研究进展[J]. *水利水电科技进展*, 2016, 36(2): 79 - 86.(ZHAO Lanhao, HOU Shichao, MAO Jia. Review of numerical simulation of landslides and surges in reservoir districts[J]. *Advances in Science and Technology of Water Resources*, 2016, 36(2): 79 - 86.(in Chinese))
- [18] GIANVITO S, XUANMEI F, QIANG X, et al. Some considerations on the use of numerical methods to simulate past landslides and possible new failures: the case of the recent Xinmo landslide (Sichuan, China)[J]. *Landslides*, 2018, 15: 1 359 - 1 375.
- [19] 刘广煜, 徐文杰, 佟彬, 等. 基于块体离散元的高速远程滑坡灾害动力学研究[J]. *岩石力学与工程学报*, 2019, 38(8): 1 557 - 1 566.(LIU Guangyu, XU Wenjie, TONG Bin, et al. Study on dynamics of high-speed and long run-out landslide hazards based on block discrete element method[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and*

- Engineering, 2019, 38(8): 1 557 - 1 566.(in Chinese)
- [20] 肖思友, 苏立君, 姜元俊. 碎屑流冲击柔性网的离散元仿真研究[J]. 岩土工程学报, 2019, 41(3): 526 - 533.(XIAO Siyou, SU Lijun, JIANG Yuanjun. Numerical investigation on flexible barriers impacted by dry granular flows using DEM modeling[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2019, 41(3): 526 - 533.(in Chinese))
- [21] 蒋明镜. 现代土力学研究的新视野——宏微观土力学[J]. 岩土工程学报, 2019, 41(2): 195 - 254.(JIANG Mingjing. New paradigm for modern soil mechanics: Geomechanics from micro to macro[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2019, 41(2): 195 - 254.(in Chinese))
- [22] 冯 春, 李世海, 王 杰. 基于 CDEM 的顺层边坡地震稳定性分析方法研究[J]. 岩土工程学报, 2012, 34(4): 717 - 724.(FENG Chun, LI Shihai, WANG Jie. Stability analysis method for bedding rock slopes under seismic load[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2012, 34(4): 717 - 724.(in Chinese))
- [23] 李世海, 冯 春, 周 东, 等. 滑坡研究中的力学方法[M]. 北京: 科学出版社, 2018: 332 - 348.(LI Shihai, FENG Chun, ZHOU Dong, et al. Mechanical methods in landslide research [M]. Beijing: Science Press, 2018: 332 - 348.(in Chinese))
- [24] 季顺迎, 赵金凤, 狄少丞, 等. 面向环境力学的离散元分析软件研发和工程应用[J]. 计算机辅助工程, 2014, 23(1): 69 - 75.(JI Shunying, ZHAO Jinfeng, DI Shaochen, et al. Development and engineering application of discrete element analysis software for environmental mechanics[J]. Computer Aided Engineering, 2014, 23(1): 69 - 75.(in Chinese))
- [25] HOOVER W G. Two-dimensional computer studies of crystal stability and fluid viscosity[J]. The Journal of Chemical Physics, 1974, 60(10): 4 043.
- [26] 刘嘉英, 马 刚, 周 伟, 等. 基于离散元的颗粒材料三维临界状态与剪胀特性研究[J]. 水利学报, 2017, 48(9): 1 107 - 1 117.(LIU Jiaying, MA Gang, ZHOU Wei, et al. Three-dimensional critical state and dilatancy of granular materials based on DEM[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2017, 48(9): 1 107 - 1 117.(in Chinese))
- [27] POLLARD D D, FLETCHER R C. Fundamentals of Structural Geology[J]. Fundamentals of Structural Geology, 2005: 512.
- [28] YIN H, ZHANG J, MENG L, et al. Discrete element modeling of the faulting in the sedimentary cover above an active salt diapir[J]. Journal of Structural Geology, 2009, 31(9): 989 - 995.
- [29] LIU C, POLLARD D D, SHI B. Analytical solutions and numerical tests of elastic and failure behaviors of close-packed lattice for brittle rocks and crystals[J]. Journal of Geophysical Research Solid Earth, 2013, 118(1): 71 - 82.
- [30] LIU C, QIANG X, SHI B, et al. Mechanical properties and energy conversion of 3D close-packed lattice model for brittle rocks[J]. Computers and Geosciences, 2017, 103(C): 12 - 20.
- [31] 胡训健, 卞 康, 刘 建, 等. 细观结构的非均质性对花岗岩蠕变特性影响的离散元模拟研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2019, 38(10): 2 069 - 2 083.(HU Xunjian, BIAN Kang, LIU Jian, et al. Discrete element simulation study on the influence of microstructure heterogeneity on the creep characteristics of granite[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2019, 38(10): 2 069 - 2 083.(in Chinese))
- [32] CUNDALL P A, STRACK O D L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. Geotechnique, 2008, 29(30): 331 - 336.
- [33] 覃金帛, 曾志强, 梁 藉, 等. GPU 并行优化技术在水利计算中的应用综述[J]. 计算机工程与应用, 2018, (3): 23 - 29.(QIN Jinbo, ZENG Zhiqiang, LIANG Jie, et al. Review of application GPU technology in hydraulic parallel optimization calculation[J]. Computer Engineering and Applications, 2018, (3): 23 - 29.(in Chinese))
- [34] 张晓宇, 许 强, 刘 春, 等. 黏性土失水开裂多场耦合离散元数值模拟[J]. 工程地质学报, 2017, 25(6): 1 430 - 1 437.(ZHANG Xiaoyu, XU Qiang, LIU Chun, et al. Numerical simulation of drying cracking using multi-field coupling discrete element method[J]. Journal of Engineering Geology, 2017, 25(6): 1 430 - 1 437.(in Chinese))
- [35] LIU Y, ZHANG D, WANG G Y, et al. Discrete element method-based prediction of areas prone to buried hill-controlled earth fissures[J]. Journal of Zhejiang University Science A, 2019, 20(3): 794 - 803.
- [36] 朱晨光, 刘 春, 许 强, 等. 滑坡滑带摩擦热离散元数值模拟研究[J]. 工程地质学报, 2019, 27(3): 651 - 658.(ZHU Chenguang, LIU Chun, XU Qiang, et al. Discrete element numerical simulation research on friction heat in sliding zone of the landslide[J]. Journal of Engineering Geology, 2019, 27(3): 651 - 658.(in Chinese))
- [37] KLOSS C, GONIVA C, HAGER A, et al. Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM[J]. Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal, 2012, 12(2/3): 140.
- [38] NOROUZI H R, ZARGHAMI R, SOTUDEH - GHAREBAGH R, et al. CFD - DEM applications to multiphase flow[M]. Coupled CFD-DEM modeling: formulation, implementation and application to multiphase flows, 2016.
- [39] 戴 轩, 郑 刚, 程雪松, 等. 基于 DEM-CFD 方法的基坑工程漏水漏砂引发地层运移规律的数值模拟[J]. 岩石力学与工程学报, 2019, 38(2): 396 - 408.(DAI Xuan, ZHENG Gang, CHENG Xuesong, et al. Numerical simulation of ground movement induced by leakage of groundwater and sand in excavations based on the DEM-CFD method[J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering,

- 2019, 38(2): 396 - 408.(in Chinese))
- [40] 郭照立, 郑楚光. 格子 BOLTZMANN 方法的原理及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009: 201 - 216.(GUO Zhaoli, ZHENG Chuguang. Theory and applications of lattice boltzmann method[M]. Beijing: Science Press, 2009: 201 - 216.(in Chinese))
- [41] HAN Y, CUNDALL P A. LBM-DEM modeling of fluid-solid interaction in porous media[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2013, 37(10): 1 391 - 1 407.
- [42] ROBINSON M J, LUDING S, RAMAIOLI M. Fluid-particle flow simulations using two-way-coupled mesoscale SPH-DEM and validation[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2014, 59(2): 121 - 134.
- [43] 季顺迎, 谭援强. 颗粒材料计算力学专题序[J]. 力学学报, 2019, 51(1): 14 - 15.(JI Shunying, TAN Yuanqiang. Theme articles on "computation mechanics of granular materials" preface[J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2019, 51(1): 14 - 15.(in Chinese))
- [44] FRIES L, ANTONYUK S, HEINRICH S, et al. DEM-CFD modeling of a fluidized bed spray granulator[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(11): 2 340 - 2 355.
- [45] ZHAO T, DAI F, XU N W. Coupled DEM-CFD investigation on the formation of landslide dams in narrow rivers[J]. Landslides, 2016: 1 - 13.
- [46] 黄雨, 郝亮, 野々山人. SPH 方法在岩土工程中的研究应用进展[J]. 岩土工程学报, 2008, 30(2): 256 - 262.(HUANG Yu, HAO Liang, NONOYAMA H. The state of the art of SPH method applied in geotechnical engineering[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2008, 30(2): 256 - 262.(in Chinese))
- [47] 季顺迎. 计算颗粒力学及工程应用[M]. 北京: 科学出版社, 2019: 159 - 170.(JI Shunying. Computational granular and its engineering application[M]. Beijing: Science Press, 2019: 159 - 170.(in Chinese))
- [48] ZHENG X, DUAN W Y, MA Q W. Comparison of improved meshless interpolation schemes for sph method and accuracy analysis[J]. Journal of Marine Science and Application, 2010, 9(3): 223 - 230.
- [49] SHAMY U E, ABDELHAMID Y. Modeling granular soils liquefaction using coupled lattice Boltzmann method and discrete element method[J]. Soil Dynamics and Earthquake Engineering, 2014, 67: 119 - 132.
- [50] YUAN C, CHAREYRE B. A pore-scale method for hydromechanical coupling in deformable granular media[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2017, 318: 1 066 - 1 079.

附录 A: 紧密堆积离散元模型的宏微观转换公式

对于线弹性模型, 应用转换公式^[30], 模型中五个颗粒力学参数, 法向刚度(K_n)、切向刚度(K_s)、断裂位移(X_b)、初始抗剪力(F_{s0})和摩擦系数(μ_p), 可以由材料的 5 个宏观力学性质计算得到, 包括杨氏模量(E)、泊松比(ν)、抗压强度(C_u)、抗拉强度(T_u)和内摩擦系数(μ_i)。计算式为

$$K_n = \frac{\sqrt{2}Ed}{4(1-2\nu)} \quad (\text{A1})$$

$$K_s = \frac{\sqrt{2}(1-5\nu)Ed}{4(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (\text{A2})$$

$$X_b = \frac{3K_n + K_s}{6\sqrt{2}K_n(K_n + K_s)} T_u d^2 \quad (\text{A3})$$

$$F_{s0} = \frac{1-\sqrt{2}\mu_p}{6} C_u d^2 \quad (\text{A4})$$

$$\left. \begin{aligned} \mu_p &= \frac{-2\sqrt{2} + \sqrt{2}I}{2 + 2I} \\ I &= [(1 + \mu_i^2)^{1/2} + \mu_i]^2 \end{aligned} \right\} \quad (\text{A5})$$