

脆性材料破坏演化中颗粒模型参数的 标定方法与思考

李世海* 冯春 段文杰

中国科学院力学研究所, 北京 100190

摘要: 利用颗粒模型研究脆性材料的渐进破坏问题, 将面临着宏观参数的匹配及细观破裂程度的统计评价等问题。本文基于连接键颗粒模型, 提出了利用宏观应变能等效表征细观弹性参数的方法, 给出了弹性参数修正因子的一般表达式, 并通过算例研究了修正因子与颗粒平均邻居数的对应关系; 形成了个体弹簧断裂的能量表述方法及基于断裂能的能量修正方法, 并给出了相应的参数标定步骤; 提出了破裂度、破裂梯度及破裂方向等表征材料细观破裂程度的评价指标, 并通过单轴压缩算例验证了上述指标的合理性及可行性。

关键词: 代表性体积单元; 应变强度分布准则; 应变能; 断裂能; 破裂度

1 前言

脆性材料破坏的核心问题是材料内部的破裂。应变强度分布准则和颗粒模型可以分别从不同的角度表述代表性体积单元的破坏演化过程。类似于宏观地质体的破坏过程, 代表性体积单元的破坏阶段可以分为既有损伤、局部再损伤、贯穿性破坏等三个阶段, 宏观应力应变关系则包括了线性、非线性以及软化等三个过程。

应变强度分布准则^[1,2]表述在既有损伤阶段, 采用平均弹性模量; 局部再损伤和贯穿性破坏阶段引入了两种形式的应变强度密度函数, 利用该函数可以给出不同应变下的破裂面积。应变分布准则可以较为准确地描述代表性体积单元宏观应力应变曲线的整个过程。由应变强度分布函数可以表征材料内部的破裂面积; 并定义了材料破坏的破裂度。

颗粒模型^[3,4]主要通过颗粒间连接键的断裂滑移表征材料的损伤破裂过程。由于颗粒大小的随机性及颗粒排布方式的随机性, 使得裂纹可以沿着较为任意的方向扩展, 这是该模型天然的优势。然而, 为了与宏观模型进行等效, 颗粒模型面临着细观弹性参数及断裂能的标定、细观破裂程度的统计方法等多种问题。为此, 本文以应变强度分布准则的基本理论为基础, 通过宏观应变能及断裂能的等效实现了细观参数的标定, 通过引入破裂度^[5]、破裂梯度及破裂方向等实现了细观破裂程度的定量表述。

2 细观弹性参数的标定

颗粒模型表征代表性体积单元的弹性阶段, 主要的问题在于颗粒之间相互作用的弹簧刚度的选取方法。对于均匀球形模型, 文[6]给出了刚度计算公式为

$$K_n = \frac{\pi E r^2}{2r} = \frac{\pi E r}{2} \quad K_t = \frac{\pi G r}{2} \quad (1)$$

其中, K_n, K_t 为两个细观弹性参数(法向刚度及切向刚度); E, G, r 分别表示材料的宏观弹性模量、

资助项目: 国家重点基础研究发展计划(973)项目(2010CB731506)资助; 国家科技支撑计划(2012BAK10B00)资助。

作者简介: 李世海*(1958—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事非连续介质力学及工程地质灾害方面的研究工作。E-mail: sh-li@imech.ac.cn.

剪切模量以及颗粒的半径。

用该公式计算代表性单元的宏观应力应变关系,计算结果与传统有限元的结果存在一定的差别,最大差别约为10%左右。为了进一步标定颗粒模型的细观弹性参数,文章提出了一种利用宏观应变能等效来标定颗粒接触刚度的方法。

设代表性体积单元的体积为 V ,该区域内包含的球的个数为 N ;假设小球之间的接触为 mN ;则有颗粒系统的弹性能为

$$L_p = \sum_{i=1,mN} \left(\frac{1}{2} K_{ni} u_{ni}^2 + \frac{1}{2} K_{si} u_{si}^2 \right) = \sum_{i=1,mN} \left(\frac{1}{2} \frac{\pi E r_i}{2} u_{ni}^2 + \frac{1}{2} \frac{\pi G r_i}{2} u_{si}^2 \right) \quad (2)$$

对应的连续弹性体的能量为

$$L_e = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega \quad (3)$$

令细观与宏观的应变能之比为 $\alpha(r) = \frac{L_p}{L_e}$,对于给定的颗粒分布,可得到修正后的接触刚度系数为:

$$K_n = \frac{\alpha \pi E r}{2} \quad K_s = \frac{\alpha \pi G r}{2} \quad (4)$$

对于非球形,修正后的法向刚度及切向刚度可表述为

$$K_n = \frac{\pi E (r_s + r_i)^2}{2(r_s + r_i)} = \frac{\pi E \bar{r}}{2}; K_s = \frac{\pi G \bar{r}}{2} \quad (5)$$

其中, \bar{r} 为相互接触的非球形颗粒的平均半径, r_s 为接触颗粒中较小的半径值, r_i 为接触颗粒中较大的半径值。

可以看出,该模型中刚度系数与球的半径具有线性关系,事实上,当球的半径不同时,球的表面积和球的体积相差一个尺度,一大球可能接触的球数与其半径的平方成正比,而球的体积与其半径的立方成正比。当球的尺寸发生变化时,刚度系数将随之发生变化。在此提出了新的刚度系数计算方法:

$$K_n = \frac{\alpha \pi E r_s^2}{r_s + r_i}; K_s = \frac{\alpha \pi G r_s^2}{r_s + r_i} \quad (6)$$

$$\alpha = \frac{L_p}{L_e} = \frac{\sum_{i=1,mN} \left(\frac{1}{2} \frac{\pi E r_s}{r_s + r_i} u_i^2 + \frac{1}{2} \frac{\pi G r_s}{r_s + r_i} u_i^2 \right)}{L_e} \quad (7)$$

可以看出,弹簧刚度系数具有平均意义,与其颗粒直径和接触类型有关。该方法考虑了弹簧的个性,同时也引入了宏观的整体特性。

为了验证颗粒细观弹性参数的标定方法,建立长宽均为10cm的二维颗粒流模型,并在模型顶部及底部各放置一钢板(采用有限元单元进行离散)(图1)。数值计算时,底板固定,在顶板上施加1MPa的压应力,统计颗粒应变能与颗粒数量、颗粒半径、颗粒排布、颗粒级配之间的关系。颗粒体系的输入弹性模量为30GPa,泊松比0.3,密度2500kg/m³。

共进行了5种工况下的分析,分别为:

工况1:保证颗粒总面积与试样面积一致(0.01m²),改变颗粒半径及颗粒数量(颗粒数量200~50000),共12组算例;

工况2:保证颗粒半径一致(0.728mm),改变颗粒数量(5000~7000),共6组算例;

工况3:保证颗粒半径及数量一致(半径0.728mm,数量6000),改变颗粒排布方式,共6组算例;

工况4:保证颗粒数量一致(6000),改变颗粒半径(0.67mm~0.82mm),共6组算例;

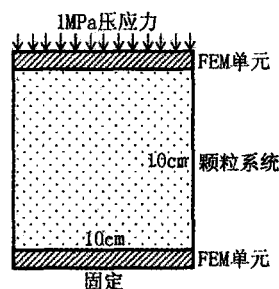


图1 细观弹性参数标定模型

工况 5: 设颗粒半径服从均匀分布, 保证期望一致(0.7mm), 改变标准差(0~0.35mm), 共 6 组算例。

经过分析, 颗粒体系的平均邻居数是影响颗粒细观应变能的主控量, 因此对各工况下颗粒体系应变能与平均邻居数的关系进行统计分析(如图 2), 采用型如 $y = ax^{-b}$ 的公式进行拟合, 得拟合结果如图 3 所示, 拟合公式为 $y = 9.13x^{-2.54}$, 拟合相关系数 0.967。

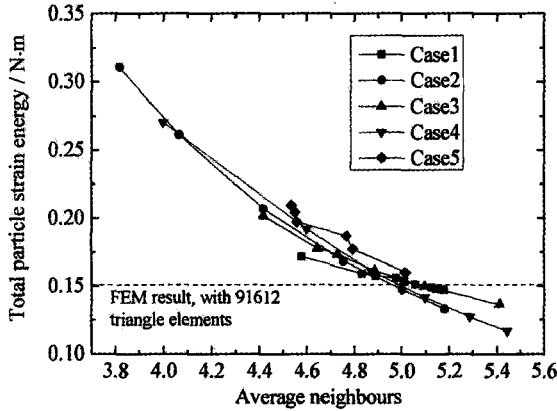


图 2 颗粒应变能与平均邻居数的关系

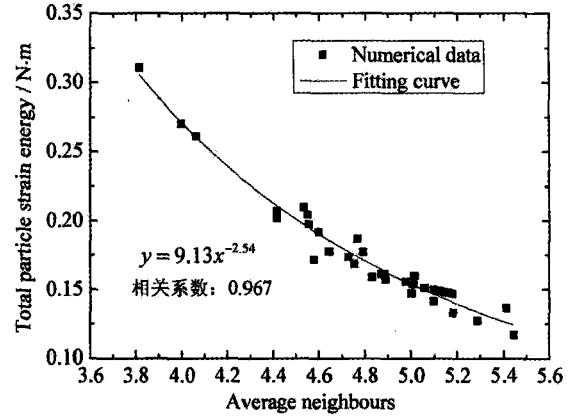


图 3 颗粒应变能与平均邻居数拟合关系

利用 91612 个有限元三角形单元计算获得的试样应变能为 $0.151 \text{ N} \cdot \text{m}$, 根据上述定义可获得修正系数 α 随平均邻居数的变化关系(图 4), 具体表达式如 8 式所示。由图 4 及式 8 可得, 当平均邻居数为 5 时, 修正系数为 1。

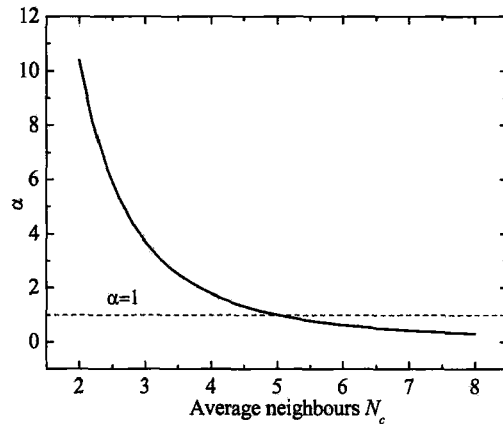


图 4 修正系数 α 与平均邻居数 N_c 的关系

$$\alpha = 60.5N_c^{-2.54} \quad (8)$$

3 个体弹簧断裂的表述方法

弹簧可以自由断开, 是颗粒模型表征材料特性的优势。材料内部的断裂过程是外力对代表性单元所做的功通过材料的弹性能转化为局部断裂能的过程。假设断裂瞬间材料的变形没有改变, 断裂产生的动能还没有表现出来, 因此可以认为断裂能直接消耗弹性势能。目前表征弹簧的断裂主要包括两类模型, 一类是线性断裂模型, 一类是弹簧损伤模型。鉴于在颗粒尺度上, 材料的非线性及损伤特性失去了颗粒模型的优势, 因此本文仅讨论线性断裂模型中的参数标定问题。

该模型认为, 当材料达到断裂应变时, 弹性能全部消失。这意味着文[6]给定的模型在断裂时, 与断裂弹簧相关的两个颗粒所代表的弹性区域的弹性能全部转化为断裂能。如果裂纹的特征面积为 S , 断裂能为 G_f , 消耗的弹性能为 SG_f 。设断裂能代表的区域为 SD , 则随着颗粒半径的增大, 断裂能

消耗弹性能代表的区域 SD 也将增大,这并不合理。事实上,断裂能的消耗仅与破裂面积有关,不当与体积成正比。

在 SD 区域内的弹性能可表述为

$$\frac{1}{2}S(r_s+r_l)\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}=\frac{1}{2}\frac{\alpha\pi Er_s^2}{r_s+r_l}u^2 \quad (9)$$

设断裂能为 $\pi r_s^2 G_f$, 则如果 $\frac{1}{2}\frac{\alpha\pi Er_s^2}{r_s+r_l}u^2 < \pi r_s^2 G_f$, 即 $G_f > \frac{1}{2}\frac{\alpha E}{r_s+r_l}u^2$, 则表明计算消耗的弹性能比实际的少了;反之,计算的多了。

在线弹性断裂模型中,断裂瞬间两颗粒间的位移保持不变,弹簧的应力也不能改变,因此引入断裂能是该模型面临的难题。本文提出了借助改变断裂颗粒及相邻颗粒动能的方法来削减断裂能。

令剩余弹性能为

$$L_r = \pi r_s^2 G_f - \frac{1}{2}\frac{\alpha\pi Er_s^2}{r_s+r_l}u^2 \quad (10)$$

当该能量大于零时,说明弹性能全部消失后还不足以弥补应当损失的断裂能;反之,说明失去的弹性能大于了断裂能。

设断裂颗粒及周边颗粒的总质量为 m_u 。若断裂时刻,颗粒的速度为 v_0 ,修正后的速度为 v_m , 则有

$$v_m^2 = v_0^2 - \frac{2L_r}{m_u} \quad (11)$$

4 断裂能 G_f 的标定方法

G_f 是脆性材料的宏观参数,在常规的材料实验中,只能给出应力应变关系,无法确定断裂能。本文借助颗粒模型和宏观实验,给出了一种特定颗粒模型下确定 G_f 的方法。颗粒流计算时输入的强度参数包括断裂拉应变、断裂剪应变、摩擦角以及断裂能,但这些参数并非代表性单元尺度的材料参数。为此,需要通过宏观材料试验标定颗粒尺度的参数,标定步骤如下:

- (1) 给定材料宏观实验的几何尺寸,施加位移边界条件;
- (2) 给定颗粒模型的线性比例极限应变、断裂应变以及摩擦角;
- (3) 设定断裂能参数 G_f (计算时仅反分析该参数);
- (4) 在颗粒模型中施加位移边界条件,按照动态松弛法计算,直至达到稳定状态;
- (5) 获得模拟试样的位移场及力场;
- (6) 记录边界上作用于所有颗粒上的力所做的功 A_f ;
- (7) 返回第3步,变化断裂能参数,并记录参数变化后的 A_f 。
- (8) 根据宏观实验获得的边界位移-力曲线,可以得到不同加载条件下边界荷载所做的功 A_1 , 计算 $f=A_1-A_f$;
- (9) 绘制 G_f 与 f 的关系曲线并进行拟合,对应 $f=0$ 的 G_f 即为反分析得到的断裂强度参数。

5 描述颗粒模型代表性单元灾变的特征量—破裂度

在地质灾害中,破裂度是预测形成某种地质灾害的重要特征量^[5,7];在应变强度分布准则中,破裂度是预测代表性体积单元完全断裂的物理量。在颗粒模型中引入破裂度,需要根据代表性单元的破裂特性作深入的研究,此处仅给出破裂度分析的基本框架。

- (1) 给定颗粒分布及弹性状态下代表性单元的受力状态;
- (2) 计算所有可能的接触,并按照接触对中较小半径颗粒的横截面积进行统计,给出接触总面积

积 A_i ;

(3) 施加荷载, 统计破裂面积 A_i 及破裂位置。

首先定义总体破裂度, 为

$$D = A_i / A_i \quad (12)$$

其中, D 为标量, 表示整个代表性体积单元的损伤状况。

其次, 当代表性体积单元内部存在非均匀分布的破裂时, 标量 D 无法完全表述, 需要定义新的特征量。假设代表性单元为长方体, 以某一底角为原点, 建立破裂度和坐标的统计函数, 统计破裂面积与破裂位置的关系, 为

$$fD(x_0, y_0, z_0) = Ab(0 < x < x_0, 0 < y < y_0, 0 < z < z_0) \quad (13)$$

其中, fD 包含了这个破裂场的所有信息。

计算 fD 对空间的梯度, 可以得出三个矢量函数, 定义为:

$$fD_i(x, y, z) = \frac{\partial fD}{\partial x_i} \quad (14)$$

由于上述矢量函数过于复杂, 无法直接使用, 因此需要把矢量函数简化为普通矢量。定义

$$DD_i = \frac{1}{VL_i} \int fD_i dx dy dz \quad (15)$$

为破裂梯度矢量, 其中 L_i 是代表性体积单元在 i 方向的长度。此处, 破裂梯度矢量代表在不同方向上的贯穿程度。

定义

$$nDD_i = \int_n fD_i dx dy dz \quad (16)$$

为破裂方向矢量, 归一化的破裂方向矢量代表了裂纹的整体方向。

上述破裂梯度矢量及破裂方向矢量为描述内部不均匀破裂提供了一个特征量, 与代表整体情况的破裂度共同形成了对破裂情况的统计描述。

为了对上述表征方法进行验证, 建立高 10cm、宽 5cm 的二维单轴压缩数值模型, 并采用 13097 个颗粒进行离散(最小颗粒半径 0.228mm, 最大颗粒半径 0.422mm)。模型底部法向约束, 顶部施加竖直向下的准静态速度载荷。颗粒体系的密度为 2500kg/m³, 弹性模量为 30GPa, 泊松比为 0.22, 抗拉强度及黏聚力均为 3MPa, 内摩擦角 30°。

该模型的宏观应力应变曲线及破裂度变化曲线如图 5 所示, 峰值后轴向微应变为 258 时的破裂场(图 5 中 P1 位置)如图 6 所示(图中黑色线段表示剪切破坏, 红色线段表示拉伸破坏)。

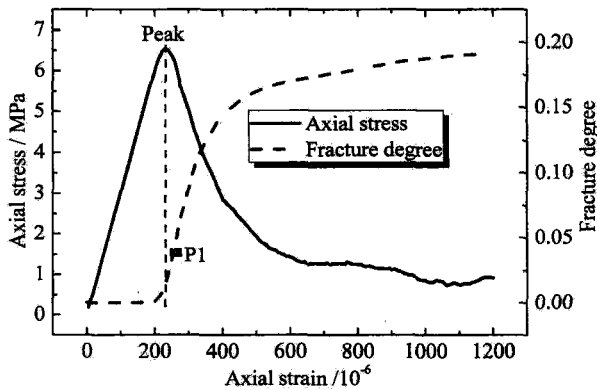


图 5 轴向应力及总破裂度随轴向应变的变化规律

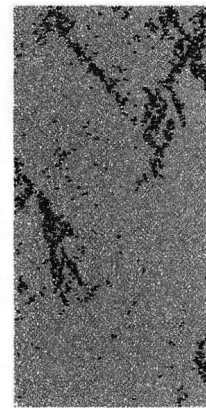


图 6 峰值后轴向微应变 258 时的破裂场

对图 6 所示的破裂场进行统计, 可得:

总体破裂度:4.2%,试样已经出现贯穿性破坏;

破裂梯度矢量: $DD_x = 7.53, DD_y = 7.69$,表明 x, y 方向破裂程度近似;

破裂方向矢量: $nDD_x = 0.44, nDD_y = 0.90$,表明整体裂纹与 x 轴夹角为 64 度或 116 度。

6 结语

为了使颗粒模型更好地表征材料的宏观力学行为,本文提出了基于弹性应变能等效及断裂能等效的细观参数标定方法,并形成了破裂度、破裂梯度及破裂方向等表征材料细观破裂程度的评价指标。本文通过相关算例给出了细观弹性修正因子的表达式,并验证了利用破裂度等指标表征材料破坏特征的可行性。

本文所提出的方法是构建材料宏细观力学行为内在联系的有效尝试,大量的实验验证及数值验证是后续的主要工作。

参考文献

- [1] Li SH, Zhou D. Progressive Failure Constitutive Model Of Fracture Plane In Geomaterial Based On Strain Strength Distribution [J]. International Journal Of Solids And Structures, 2013, 50(3-4):570-577.
- [2] 李世海,周东. 脆性材料损伤表述方法及基于应变强度分布破坏准则的计算单元[J].水利学报,2012,43(增刊1):8-12.
- [3] Itasca Consulting Group Inc. PFC-3D Version 3.0 Manual [R]. Minneapolis, USA: Itasca Consulting Group Inc., 2003.
- [4] Oñate E, Rojek J. Combination of discrete element and finite element methods for dynamic analysis of geomechanics problems [J]. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2004, 193(27): 3087-3128.
- [5] 李世海,周东,刘天革. 基于破裂度的堆积层滑坡危险性分析方法[J].岩石力学与工程学报,2013,32(增2):3909-3917.
- [6] 冯春,李世海,刘晓宇. 一种有限元转化为颗粒离散元的方法及其应用[J]. 岩土力学, 2014(待刊).
- [7] 李世海,周东,王杰,等. 水电能源开发中的关键工程地质体力学问题[J].中国科学:物理学 力学 天文学,2013,43(12):1602-1616.