文章编号：1000-5773(2006)04-0379-07

冲击动力学中离散元与有限元相结合的计算方法研究*

傅 华，刘仓理，王文强，李 涛

（中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理实验室，四川绵阳 621900）

摘要：阐述了一种离散元与有限元法相结合的计算方法，编制了可应用于细观模拟的二维程序，对受冲击载荷作用的均匀材料和非均匀材料的响应特征进行了计算，并对数值模拟进行了验证。计算结果与理论值较吻合，验证了方法的可行性。

关键词：有限元；离散元；细观模拟；计算方法

中图分类号：O347.1 **文献标识码**：A

1 引 言

离散元法又称 DEM(Discrete Element Method)法，它的思想源于较早的分子动力学(Molecular Dynamics)。1971 年由 Cundall 最先提出，其研究对象是岩石等非连续介质的力学行为。1979 年，Cundall和 Strack 又提出适于土力学的离散元法。国内出现了用于土木工程设计的块体离散元分析系统 2D-Block 和三维离散单元法软件 TRUDEC(王泳嘉等)[1]；在冲击波研究方面，唐志平等建立了二维和三维细观离散元理论和 DM2 程序[2-4]。

离散元方法与分子动力学方法、无网格方法以及其它粒子方法等新兴算法具有很大的相似性。不难发现这几种算法的共同之处在于：它们都是将信息存储于一个节点上，通过节点间的相互作用建立相互的联系。有限元等传统数值方法适合于解决连续介质问题，而离散单元法适合于界面弱连接的非连续介质问题或连续体到非连续体转化的材料损伤破坏问题。因此，如能将离散元法与有限单元法和边界单元法等有机地结合起来，充分发挥各自的长处，可以极大地扩大该数值方法的应用范围[5]，特别是在模拟细观多相材料动态特征的研究方面，其优势尤为突出。近年来，Munjiza[6-7]等人将离散元有限元耦合模型计算用于分层破坏和结构失稳问题的研究，唐志平等人用将离散元有限元相结合计算用于受拉铝板在激光辐照下的破坏模拟研究[8]以及多尺度结合应用研究[9]，Ransing 等[10]用于应用离散和连续建模方法模拟粉末压实过程的研究，Tsuji 等[11]将离散元与流体动力学结合研究颗粒两相流，Owen 等[12]利用离散元与有限元结合的方法对多重断裂固体和离散系统的模拟研究，K. Han [13]利用离散元与有限元结合研究了子弹碰撞过程问题。可见，离散元与其它算法的融合是其推陈出新不断向前发展的一个必然趋势。

本文着重阐述了一种含有一层过渡层的离散元与有限元的结合方法，编制了可应用于细观模拟的二维计算程序，对受冲击载荷作用的均匀材料和非均匀材料的响应特征进行了模拟，计算结果与理论值较吻合，验证了方法的可行性。

2 结合方法

由于离散元方法并不严格遵守三个基本守恒方程，与传统的连续介质力学计算方法有着不同的控

* **收稿日期**：2005-10-11；**修回日期**：2005-11-22

基金项目：中国工程物理研究院流体物理研究所发展基金(FZ04003)

作者简介：傅 华(1978—)，男，硕士研究生，主要从事爆轰理论及其应用研究. E-mail：fmyfuhua@163.com

制方程;此外,离散元法中本构关系、物理量的求解与有限元法也有所差异。这些都为两种方法的结合带来了困难。

2.1 离散元方法[2]

离散元法的基本思想是把不连续体或连续体离散为具有一定物理意义的独立"微元"或"粒子",相邻的单元之间存在一种或几种作用力,单元的运动受牛顿第二运动定律支配,用时步迭代的方法求解各单元的运动方程,通过研究离散元系统的整体运动形态得到模拟对象的力学、热学、物理和化学的状态分布和演化规律。

$$m_i \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}^i}{\mathrm{d}t^2} = \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{f}_{ji} + \boldsymbol{F}^i \tag{1}$$

$$\boldsymbol{J}^i \frac{\mathrm{d}^2 \bar{\theta}^i}{\mathrm{d}t^2} = \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{k}_{ji} + \boldsymbol{K}^i \tag{2}$$

(1)式是力作用下的运动方程。其中 m_i 为单元 i 的质量;$\boldsymbol{r}^i$ 一般为单元 i 形心的位移矢量;$\boldsymbol{f}_{ji}$ 表示与单元 i"接触"的某单元 j 对单元 i 的"接触力";$\boldsymbol{F}^i$ 为单元 i 所受的其它外力,如在研究流场作用下的固体颗粒的作用时,该项代表流体压力等效的结点作用力,n 为单元 i 接触的单元数目。(2)式为力矩作用下的运动方程,其 $\boldsymbol{J}^i$ 为单元 i 的转动惯量;$\bar{\theta}^i$ 为单元 i 的转角,$\boldsymbol{k}_{ji}$ 表示与单元 i"接触"的某单元 j 对单元 i 的力矩;$\boldsymbol{K}^i$ 为单元 i 所受的其它外力矩。

在物体的离散化方面,离散元法的离散思想同有限元法有着相似之处,即将所研究的区域划分成各种单元,并通过节点建立单元间的联系。离散元法的单元从几何形状上分类可分为块体元和颗粒元两大类,块体元中最常用的有四面体元、六面体元;对于二维问题可以是任意多边形元,但应用范围不广。每个离散单元只有一个基本节点(取形心点)。如图 1 所示颗粒元主要是对于二维问题采用圆盘形单元,还有人采用椭球体单元和椭圆形,但不常用。离散单元本身一般为刚体,单元间的相对位移等变形行为一般由连结于节点间的变形元件来实现。变形元件主要有:弹簧、粘壶(阻尼)、摩擦元件等物理性质不同的连接形式,各种性质的基本元件的不同形式的组合便迎合了丰富多彩的本构关系[14]。

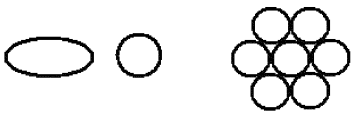


图 1 离散元单元及排列

Fig. 1 Discrete element and array

2.2 Lagrange 动力有限元法

采用 Lagrange 描述法,根据连续介质力学的质量、动量和能量三个基本守恒方程,并考虑边界条件,可以得到有限元分析的平衡控制方程组的矩阵形式[15]

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{x}}(t) + \boldsymbol{F}(x,t) - \boldsymbol{p}(x,t) = \boldsymbol{0} \tag{3}$$

式中:$[\boldsymbol{M}]$是总质量矩阵,由单元质量矩阵$[\boldsymbol{m}]$组集得到,$\{\ddot{\boldsymbol{x}}\}$为节点加速度矢量,$\{\boldsymbol{F}(x,t)\}$是由单元应力场的等效节点力矢量组集得到的总体矢量,$\{\boldsymbol{p}(x,t)\}$为总体载荷矢量,由节点集中载荷,以及面力、体力、基础运动的等效节点组集得到。

采用显式中心差分的积分方法,最终归结于求解节点的运动方程

$$m_i \ddot{\boldsymbol{d}}_i^t = \sum \boldsymbol{f}_{ji}^t + \boldsymbol{F}_i^{\mathrm{ex}} \tag{4}$$

式中:m_i 为节点的质量,$\ddot{\boldsymbol{d}}_i^t$ 是该节点在 t 时刻的加速度,$\boldsymbol{f}_{ji}^t$ 为 t 时刻单元 j 对节点 i 的集中力的贡献,j 的范围取决于与节点 i 相连的单元数,$\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{ex}}$ 为 t 时刻节点 i 所受到的外力。

2.3 离散元与有限元的结合

要使两种方法能有效地结合在同一计算模型中,关键的问题是使离散元与有限元之间的各种物理参数有一个平滑的过渡。比较(1)式和(4)式,两种方法的求解过程存在相似之处,其中 $\sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{f}_{ji}$ 与 $\sum \boldsymbol{f}_{ji}^t$ 分别是离散元与有限元所受到的内力,$\boldsymbol{F}^i$ 与 $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{ex}}$ 分别是离散元与有限元所受到的外力,这种相似性为我们将两种方法结合提供了可能。

由于离散元计算作用力时,只有短程力起作用,即只有与此单元相邻的元(即邻居元)才会对此单元有作用力,考虑到离散元的这一计算特性,并结合有限元的计算特点,采用如图 2 所示含有一层过渡层的计算模型。过渡层中被当作离散元单元处理的有限元节点(点画圆)相对应的邻居单元如图 3 所示。有限元节点所受邻居元作用的合力 $\sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{f}_{ji}$(本模型中 $n=2$)是作为节点外力 $\boldsymbol{F}_i^{\mathrm{ex}}$ 施加在相应的有限元节点上的;同时被当作离散元处理的有限元节点也是离散元的邻居单元,参与离散元区域的物理量求解。除了过渡层和力边界外,其余部分的节点外力均为零,在过渡层之外的离散元区域和有限元区域则分别按照各自的方法求解。对均匀材料,物理量通过过渡层平滑过渡;对于非均匀材料,不同材料区域分别采用两种方法计算,由于阻抗的不匹配,在材料界面处发生反射和透射现象。

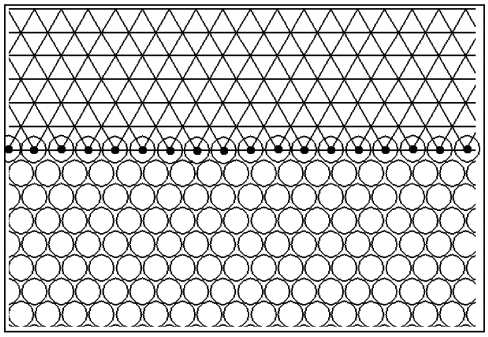


图 2　有限元与离散元过渡简图

Fig. 2　Combined finite element and discrete element through transition layer

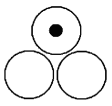


图 3　过渡层中有限元的邻居单元

Fig. 3　Neighbor element of finite element in transition layer

在编写的二维程序中,每一个时间步长内,过渡边界中的离散元和有限元相互为对方提供边界条件。所取的时间步长需考虑有限元与离散元两种计算方法的稳定性要求。有限元求解步长的稳定性要求取决于所用的差分格式,本研究所采用的中心差分法是条件稳定算法,它要求

$$\Delta t = h_{\min}/c \tag{5}$$

式中:$h_{\min}$为有限元三角形最小高,c 为声速。

离散元求解步长的稳定性要求比较繁琐,主要有几何和物理两方面的限制。几何方面,元 i 和元 j 不允许在一个时间步长内沿它们的中心轴线互相贯穿对方,即

$$\Delta t \leqslant \Delta t_{\mathrm{cr}}^{\mathrm{G}} = (r_0^i + r_0^j)/v_n^{ij} \tag{6}$$

式中:$\Delta t_{\mathrm{cr}}^{\mathrm{G}}$为几何约束临界步长,$v_n^{ij}$ 为元 i 和元 j 的轴向(对心)相对速度。物理方面,要求一个时间步长内所产生的动量转移不应超过整个碰撞过程中全部的动量转移,即

$$\boldsymbol{F}^{ij}\Delta t = m^j \boldsymbol{v}^j \leqslant \boldsymbol{M} \tag{7}$$

式中:$\boldsymbol{F}^{ij}\Delta t$ 为冲量,$m^j\boldsymbol{v}^j$ 为元 j 得到的动量,$\boldsymbol{M}$ 为在整个碰撞过程中元 j 所能获得的最大动量。最后,离散元时间步长可写为

$$\Delta t \leqslant d_0^i/c'_{ij} \tag{8}$$

式中:$d_0^i = r_0^{ij} = r_0^i + r_0^j$,等效声速 $c'_{ij} = \sqrt{3(1+\beta)E_0^{ij}/2(2-\varphi)\rho^i}$,$\beta = m^i/m^j$,$\varphi \in [0,1]$为非弹性系数。为了保证足够的分辨率,离散元所取的时间步长往往是临界步长的几百分之一,明显小于有限元。为了简单起见,结合方法中采用同一时间步长,即采用离散元确定的时间步长,同时也满足有限元稳定性的要求。

当过渡边界无滑移、脱粘等分离现象时,离散元与有限元节点的位移、压力是连续的。当过渡边界发生分离现象时,离散元与有限元节点的邻居关系和外加受力发生变化,过渡层中只受压应力,无拉应力。

3　方法验证

为了验证结合方法的可行性,分别对受冲击载荷作用下均匀材料和非均匀材料的响应进行了数值模拟。

3.1　均匀材料算例

为了验证上述结合方法的可行性,在均匀材料中,同一加载条件下,比较单纯使用离散元方法与使

用有限元与离散元相结合方法的计算结果。材料选用 ESTANE,密度为 1.27 g/cm^3,其冲击 Hugoniot 线的 u_s-u_p 形式为:$u_{s1}=1.7+2.0u_{p1}$,下方施加一冲击荷载,强度 $p=500$ MPa,持续时间 $t=0.02$ μs。计算模型如图 4 所示,元的半径 2 μm,元总数 1872 个,网格为等边三角形,边长 2 μm,总数 2648 个,时间步长 0.01 ns,计算步数 6000 步。材料本构方程采用"朱-王-唐"非线性粘弹性本构模型[5]。图 5 所示为局部放大的有限元与离散元结合的计算模型,图 6 为仅使用离散元的计算模型。两种计算模型离散元的尺寸相同。

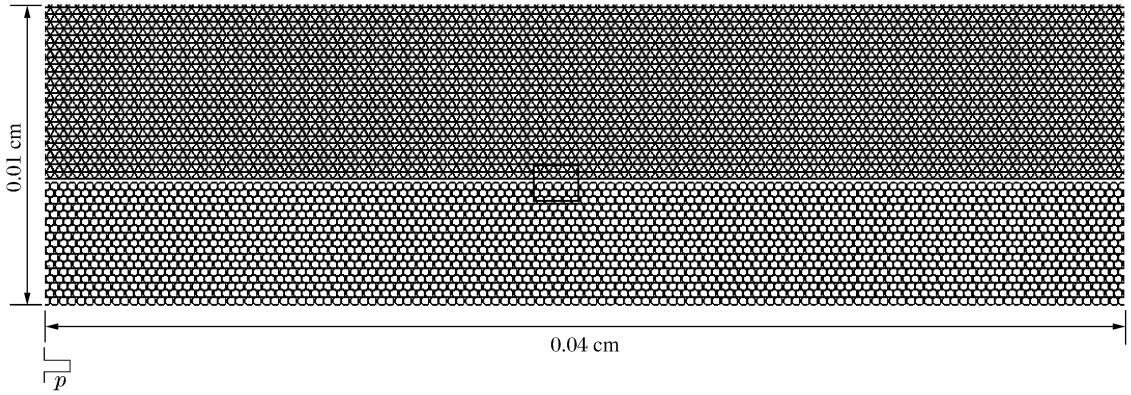


图 4 计算模型

Fig. 4 Computation model of the plate

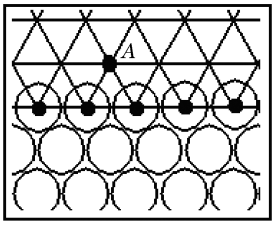


图 5 有限元与离散元结合的计算模型放大图

Fig. 5 Computation model of combined finite and discrete element method

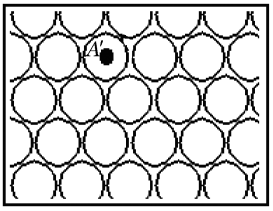


图 6 采用离散元离散的模型放大图

Fig. 6 Computation model of discrete element method

在模型相同位置处的取 A 点和 A' 点,A 点处采用有限元方法计算,A' 点处采用离散元方法计算。理论计算可得在此条件下,ESTANE 粒子速度 $u_{01}=190$ m/s,比较采用结合方法计算出的 A 点值与仅使用离散元方法计算出 A' 点值。

如图 7 所示,采用不同方法计算的两点的速度曲线吻合较好,说明所述结合方法能满足位移连续条件。图 8 中两点压力峰值基本一致,但在卸载过程差别增大,这主要是由于两种数值方法在计算应力差异所致。

3.2 非均匀材料算例

采用的计算模型中离散元区域与有限元区域材料不同,分别为 ESTANE 和 HMX,离散元区域计算参数与上例相同,有限元区域 HMX 的密度为 1.89 g/cm^3,材料本构采用弹塑性模型,剪切模量 $G=10.74$ GPa,屈服强度 $F_Y=120$ MPa,极限强度 $F_U=550$ MPa。离散元区域的材料阻抗为$(\rho_0 D)_1$,有限元区域的材料阻抗为$(\rho_0 D)_2$,且有$(\rho_0 D)_1<(\rho_0 D)_2$。入射冲击波从低阻抗(ESTANE)向高阻抗(HMX)方向传播,由于材料阻抗不匹配,将在过渡层发生透射和反射现象。

HMX 的冲击 Hugoniot 线的 u_s-u_p 形式:$u_{s2}=2.4+2.039u_{p2}$。为了讨论过渡冲击波在不同介质边界上的反射与透射现象的方便,把冲击 Hugoniot 线的 u_s-u_p 形式分别转换为 p-u_p 形式(p 单位为 Pa)

$$p_1=1270\times(1.7\times10^3+2.0u_{p1})u_{p1} \tag{9}$$

$$p_2=1890\times(2.4\times10^3+2.039u_{p2})u_{p2} \tag{10}$$

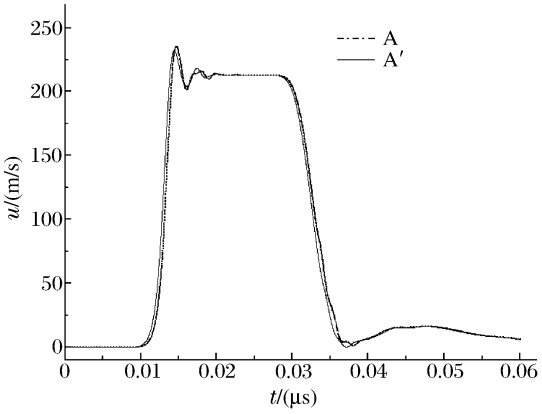


图 7　速度-时间曲线

Fig. 7　The curve of velocity versus time

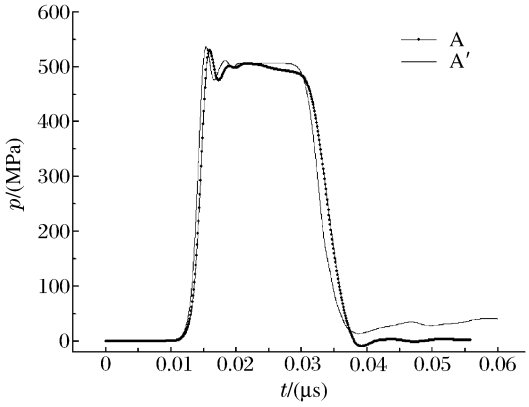


图 8　压力-时间曲线

Fig. 8　The curve of pressure versus time

当入射冲击波强度 $p_{01}=500$ MPa 时,粒子速度 $u_{01}=190$ m/s,入射冲击波到达两种材料的界面时,由于冲击波波阻抗的不同发生反射和透射,反射波应是使材料 ESTANE 从状态 1 进一步压缩加载到状态 2 的冲击波,而透射波则是使材料 HMX 从未扰动状态 0 压缩加载到状态 2 的冲击波,如图 9 所示。理论计算可得,状态 2 的 $p_{02}=680.5$ MPa,$u_{02}=134.68$ m/s。

非均匀材料的计算模型如图 10 所示,分别隔一定距离取 4 个不同的参考单元 A、B、C、D,其中 A 为过渡边界上被看作离散元处理的有限元节点,其余为离散元单元。

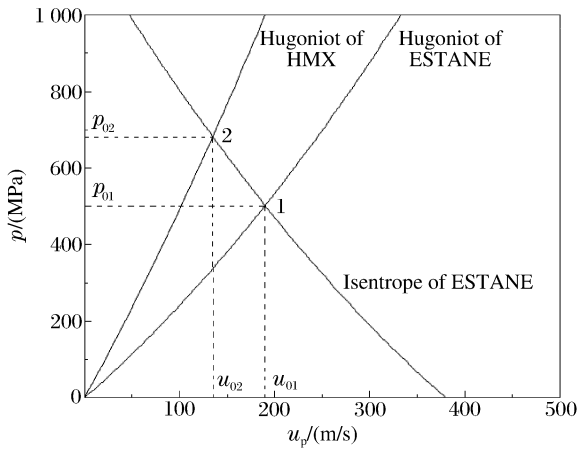


图 9　p-u 平面上物理量求解示意图

Fig. 9　Scheme of determining the shock Hugoniot of p-u

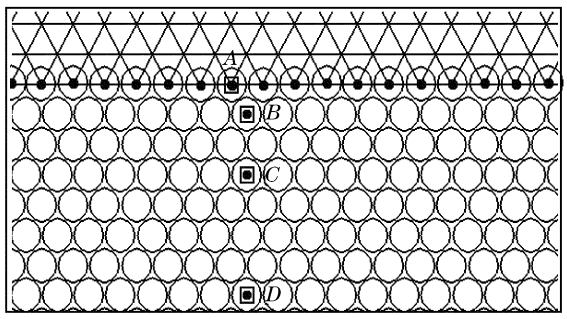


图 10　非均匀材料模型简图

Fig. 10　Computation model of heterogeneous material

模拟结果如图 11、图 12 所示,由于 D 点距离过渡界面较大,在反射波压缩前就受到稀疏波的作用;C 点距离过渡界面较小,在压缩后期受到反射波的压缩作用,压力升高,粒子速度降低;B 点、A 点处于过渡面上,分别受到反射波和透射波的作用,压力升高,粒子速度降低。

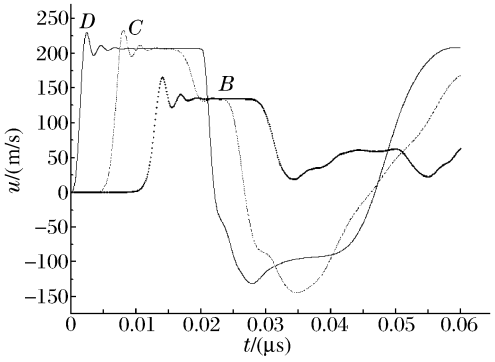


图 11 速度-时间曲线

Fig. 11 The curve of velocity versus time

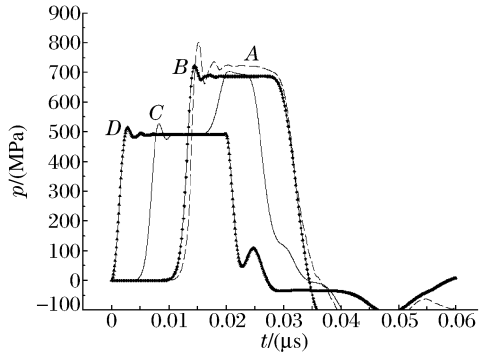


图 12 压力-时间曲线

Fig. 12 The curve of pressure versus time

4 结论与展望

通过以上两个算例,可以看出,采用本文所述结合方法,冲击波不仅可以顺利地通过均匀材料过渡层,而且也可以在非均匀材料中的过渡层面上产生反射和透射现象,模拟结果与理论值较吻合,验证了所用方法的可行性。使用该方法后的计算程序,能充分发挥了离散元和有限元各自算法的优势,使模拟受冲击荷载的非均匀混合材料的细观响应成为可能。今后,将致力于改进和完善过渡层分离后的计算方法和程序,使该方法能适用于各种复杂结构和物理过程的细观多相材料模拟。

References:

[1] Wang Y J, Xing J B. The Discrete Element Method and Its Application in Soil and Rock Mechanics [M]. Shenyang: Northeast Engineering College, 1991. (in Chinese)
王泳嘉,邢纪波. 离散单元法及其在岩土力学中的应用 [M]. 沈阳:东北工学院出版社,1991.

[2] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G. Discrete Meso-Element Dynamic Simulation of Shock Response of Reactive, Porous Solids [A]//Shock Compression of Condensed Matter-1995 [C]. New York: AIP, 1996: 657.

[3] Tang Z P, Horie Y, Psakhie S G. Discrete Meso-Element Modeling of Shock Processes in Powders [A]//Graham R A. Shock Compression of Solids(Ⅳ) [C]. New York: Springer-Verlag, 1997: 143-176.

[4] Tang Z P. Discrete Meso-Element Modeling of Shock Processes in Powders(Vol. 1)—Theory and Model Calculations [R]. NCSU, 1995.

[5] Wang W Q. The Discrete Element Method and Its Application in Material and Structure Mechanics [D]. Hefei: USTC, 2000. (in Chinese)
王文强. 离散元方法及其在材料和结构力学响应分析中的应用 [D]. 合肥:中国科学技术大学,2000.

[6] Munjiza A, John N W M. Mesh Size Sensitivity of the Combined FEM/DEM Fracture and Fragmentation Algorithms [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2002, 69: 281-295.

[7] Munjiza A, Bangash T, John N W M. The Combined Finite-Discrete Element Method for Structural Failure and Collapse [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2004, 71: 469-483.

[8] Tang Z P. 3D Discrete Meso-Element Simulation of Failure Processes for Cylindric Shells Subjected to Inner Pressure and Surface Laser Irradiation [J]. Explosion and Shock Waves, 2001, 21(l): 1-7. (in Chinese)
唐志平. 激光辐照下充压柱壳失效的三维离散元模拟 [J]. 爆炸与冲击,2001,21(l):1-7.

[9] Xu J L, Tang Z P. Combined Discrete/Finite Element Multi-Scale Numerical Method and Its Application [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2003, 20(6): 477. (in Chinese)
胥建龙,唐志平. 离散元与有限元结合的多尺度方法及其应用 [J]. 计算物理,2003,20(6):477.

[10] Ransing R S, Gethin D T, Khoei A R, et al. Powder Compaction Modelling via the Discrete and Finite Element Method [J]. Mater Design, 2000, 21: 263-269.

[11] Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanaka T. Discrete Particle Simulation of Two-Dimensional Fluidized Bed [J]. Powder Technology, 1993, 77(1): 79-87.

[12] Owen D R J, Feng Y T. Parallelised Finite/Discrete Element Simulation of Multi-Fracture Solids and Discrete Systems [J]. Eng Computation, 2001, 18(3-4): 557-576.

[13] Han K, Peric D, Owen D R J. A Combined Finite/Discrete Element Simulation of Shot Peening Processes [J]. Eng Computation, 2000, 17(6): 680-702.

[14] Liu K X, Gao L T. A Review on the Discrete Element Method [J]. Advances in Mechanics, 2003, 33(4): 483. (in Chinese)
刘凯欣,高凌天. 离散元法研究的评述 [J]. 力学进展, 2003, 33(4): 483.

[15] Wang X C, Shao M. The Finite Element Method Basic Principle and Numerical Method [M]. Beijing: Tsinghua Publishing Co MPany, 1996. (in Chinese)
王歇成,邵　敏. 有限单元法基本原理和数值方法 [M]. 北京:清华大学出版社, 1996.

A Combined Discrete/Finite Element Method in Shock Dynamics

FU Hua, LIU Cang-Li, WANG Wen-Qiang, LI Tao

(*Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: A combined discrete element method (DEM) and finite element method (FEM) is presented. A 2D program is developing for application to mesoscale simulation of heterogeneous and homogeneous material under shock loading, and the numerical simulations are testified. The results of simulation are in agreement with those of theory, which verifies that the combined method is viable.

Key words: finite element method; discrete element method; mesoscale simulation; computation method