

# 关于采用粗粒化提高颗粒材料 多尺度模拟守恒特性的研究

程宏旻\*, Thomas Weinhart

(特文特大学 工学院, 荷兰恩斯赫德 7500AE)

**摘要:**连续体-颗粒耦合方法常用来描述连续-非连续颗粒行为或解决颗粒材料与其他可变形构件间相互作用问题。粗粒化 coarse-graining(CG)是基于统计力学的均匀化方法,由离散的颗粒运动定义连续的宏观物理场。本文利用粗粒化(CG)推导有限元-离散元(FEM-DEM)表面和体积耦合的一般性表达式。对于表面耦合,CG可以将耦合力分布到颗粒-单元接触点以外的位置,如相邻的积分点;对于体积耦合,CG可以将颗粒尺度的运动均匀化到耦合单元上。由粗粒化推导出的耦合项仅包含一个参数,即粗粒化宽度,为均匀化后的宏观场定义了一个可调整的空间尺度。当粗粒化宽度为零时,表面和体积耦合表达式简化为常规局部耦合。本文通过弹性立方体冲击颗粒床和离散-连续介质间波传播两个数值算例,展示使用粗粒化方法提高耦合系统能量守恒的优势,并结合其他耦合参数(如体积耦合深度)讨论了粗粒化参数对数值稳定性和计算效率的影响。

**关键词:**体积耦合;表面耦合;粗粒化;多尺度模拟;颗粒材料

**中图分类号:** O347.7 **文献标志码:** A

## 1 引言

颗粒材料如沙土、岩石、药物粉末和农业谷物等广泛存在于自然界和工业应用中。这些材料均由离散的可自由运动的颗粒集合而成。因此,其宏观尺度力学性质由颗粒间相互碰撞及微-细观结构演变决定<sup>[1,2]</sup>。

颗粒材料微观、细观结构及其空间尺度随外部荷载变化而演变,即使仅考虑固态颗粒介质(如准静态下的剪胀<sup>[3]</sup>、塑性屈服<sup>[4]</sup>、组构张量和各向异性<sup>[5,6]</sup>),其宏观尺度上的建模也可能是相当复杂的。尽管当前宏观模型可以很好地描述准静态下复杂颗粒行为,流态颗粒介质的剪切增稠、稀化<sup>[7]</sup>及分层<sup>[8]</sup>等流变现象的宏观模拟还是非常困难,目前主要依靠颗粒及细观尺度模型来进行研究。

微-宏观耦合模拟与单纯的微观或宏观模拟相比具有明显优势。通过建立合理的耦合模型,可以保持宏观方法较高的计算效率和微观方法较高的计算精度。本文主要探讨同步多尺度方法(concurrent multi-scale methods),即微观与宏观子模型在同一个计算域上求解并在时间上同步。这需

要与基于微-宏观关系在物质点和表征单元之间传递的分层多尺度<sup>[9-11]</sup>耦合方法作出区分。同步多尺度方法主要分为两类,一是表面耦合,可用于模拟颗粒与可变形单元之间的相互作用;二是体积耦合,可用于模拟颗粒材料连续-非连续和流态-固态转换等复杂物理现象。

以有限元(FEM)和离散元(DEM)为例(图1),表面耦合通常依赖于DEM模型中可变形构件外表面与颗粒材料相接处的界面 $\Gamma^C = \Gamma^{FE} \cap \Gamma^{DE}$ 。该界面对接收来自FEM网格的运动信息,并且将颗粒与该界面间的相互作用力映射到FEM模型的牵引边界上。由于表面耦合通常通过狄拉克函数来实现<sup>[12]</sup>,施加到FEM域上的耦合力场很可能是非光滑的,导致难以处理的累积误差。目前FEM-DEM界面耦合方法的应用,如轮胎、土工膜、土工格栅与土颗粒之间的相互作用<sup>[12,19,20]</sup>,均采用基于狄拉克函数的微-宏观映射。

体积耦合又称为Arlequin多模型耦合框架,由Dhia等<sup>[13,14]</sup>提出,最初用于耦合具有不同网格分辨率的FEM模型,由Wellmann等<sup>[15]</sup>首次扩展到FEM-DEM耦合方法上。体积耦合在FEM-DEM模拟上的应用主要通过体积重叠区域 $\Omega^C = \Omega^{FE} \cap \Omega^{DE}$ (图1)上施加动态约束,使微观和宏观两个子模型的解尽可能一致<sup>[15]</sup>。而如何从微观颗粒运动信息中提取适应于FEM求解空间的

收稿日期: 2022-02-18; 修改稿收到日期: 2022-04-19.

基金项目: 荷兰教育、文化及科学部 Sector Plan Beta and Engineering 基金(科研启动金)资助项目.

作者简介: 程宏旻\*(1989-),男,博士,助理教授  
(E-mail: h.cheng@utwente.nl).

宏观场则是需要解决的难点之一。Wellmann 等<sup>[15]</sup>使用有限元形状函数构建微-宏观传递法则,将 FEM-DEM 体积耦合方法应用在单桩安装问题上,即在桩体周围变形较大区域使用 DEM,远离桩土作用范围使用 FEM,DEM 域至 FEM 域的过渡区间则采用体积耦合方法描述。

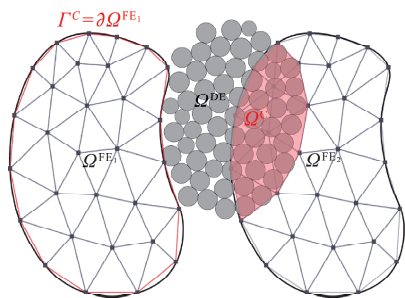


图1 同步多尺度模拟示例( $\Omega^{\text{DE}}$ 为非连续体颗粒材料, $\Omega^{\text{FE1}}$ 和 $\Omega^{\text{FE2}}$ 分别为用连续体方法描述的可变形结构与连续体颗粒材料)

Fig.1 Example of a concurrent multi-scale simulation ( $\Omega^{\text{FE1}}$  denotes a deformable structure,  $\Omega^{\text{DE}}$  the domain of the discrete particles, and  $\Omega^{\text{FE2}}$  the domain of a continuum model for the granular bulk, the surface coupling is handled at  $\Gamma^{\text{C}}$ , while the volume coupling takes place in  $\Omega^{\text{C}}$ )

本文采用粗粒化(CG)方法<sup>[16]</sup>,将非连续性的 DEM 颗粒数据首先映射到在连续体上定义的宏观场上,然后将这一宏观场耦合到 FEM 网格上。粗粒化操作引入了称为粗粒化宽度(CG width)的自定义参数,为均匀化后的宏观场定义了一个可调整的空间尺度。基于由粗粒化推导出的表面耦合和体积耦合项公式,将探讨如何通过调整 CG 宽度减小数值误差;以弹性块冲击颗粒床和离散-连续介质间的波传播两个数值算例,展示粗粒化宽度对同步多尺度耦合系统的能量守恒特性的影响,并讨论如何在保持相同能量耗散的条件下获得更高的计算效率。

## 2 基于粗粒化的 FEM-DEM 耦合方法

在同步多尺度耦合框架内,计算域  $\Omega$  划分为多个子域;每个子域中的材料行为由不同子模型描述。根据特定的耦合方法,耦合区域的定义也有所不同,如  $\Omega^{\text{C}} = \Omega^{\text{FE}} \cap \Omega^{\text{DE}}$  适用于体积耦合,而表面耦合区间则定义为  $\Gamma^{\text{C}} = \partial\Omega^{\text{FE}} \cap \partial\Omega^{\text{DE}}$ ,如图 1 所示。本节将介绍如何使用 CG 定义空间上连续的速度场和表面牵引力场,以及如何使用这些均匀化的宏观场进行表面和体积耦合。上标 DE 和 FE 表示离散元和有限元子模型,下标  $\{\alpha, \beta, \gamma, \dots\}$  和  $\{i, j, k, \dots\}$  则用来区分 DEM 和 FEM 模型的变量。

### 2.1 微-宏观传递法则

在推导基于粗粒化的微-宏观传递法则之前,简要回顾粗粒化的定义。基于统计力学对连续场的基本定义<sup>[16]</sup>,CG 可以通过空间核函数  $W(\mathbf{x})$  给出宏观物理量,如密度场  $\rho$  和速度场  $\mathbf{v}$ ,即

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho_m \circ W = \sum_{a=1}^N m_a W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (1)$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{j}/\rho, \quad \mathbf{j}(\mathbf{x}) = \sum_{a=1}^N m_a \mathbf{v}_a W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \quad (2)$$

$$W(\mathbf{x}) = C^G \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}|^2}{2(c/3)^2}\right) \text{ if } |\mathbf{x}| < c \quad (3)$$

式中  $\mathbf{v}_a$  为位于颗粒质心的刚体运动速度,  $m_a$  为颗粒质量,  $\mathbf{x}_a$  为颗粒的位置,  $\circ$  表示卷积,  $N$  为均匀化颗粒数量,  $\mathbf{j}$  为宏观动量场。  $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)$  为在颗粒质心  $\mathbf{x}$  以宽度  $c$  为支撑域半径的粗粒化函数(或核函数)。式(3)给出本文采用的高斯核函数。注意核函数必须是归一化的,即  $\int_{R^3} W(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1$ 、非负的,并在作用半径以外为 0。

#### 2.1.1 接触力与均匀化后的宏观牵引力

对于表面耦合而言,作用在耦合面上的颗粒尺度接触力需要均匀化并作为边界条件施加到 FEM 模型上,如图 1 所示。耦合表面定义为在  $\partial\Omega^{\text{FE1}}$  上各个单元  $\Omega_e (e = 1, \dots, N_e)$  有可能与颗粒相接触的面  $\Gamma_e^{\text{C}} = \partial\Omega_e \cap \partial\Omega^{\text{FE1}}$ 。为了方便计算接触力,耦合面  $\Gamma_e^{\text{C}}$  在离散元模型中离散化,由一组相互连接的三角形刚体构成  $\{T_\gamma^{\text{DE}}\}_{\gamma=1}^{N_e^{\text{W}}}$ ,其中  $N_e^{\text{W}}$  为对应每个表面耦合单元  $\Gamma_e^{\text{C}}$  的三角刚体总数。为了将非连续的接触力映射到有限元网格上,对所有颗粒-单元接触力进行粗粒化,得到表面牵引力  $\mathbf{t}^{\text{SC}}(\mathbf{x})$ ,

$$\mathbf{t}^{\text{SC}}(\mathbf{x}) = \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{\gamma=1}^{N_e^{\text{W}}} \sum_{a=1}^{N_\gamma^{\text{P}}} -\mathbf{f}_{a\gamma}^{\text{W}} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{a\gamma}^{\text{C}}) \quad (4)$$

式中  $\mathbf{f}_{a\gamma}^{\text{W}}$  为颗粒  $a$  和三角形接触  $T_\gamma^{\text{DE}}$  在接触点  $\mathbf{x}_{a\gamma}^{\text{C}}$  处的接触力。由式(4)得到的表面牵引力场  $\mathbf{t}^{\text{SC}}(\mathbf{x})$  可以通过高斯积分施加到单元  $e$  的节点  $i$  上,即

$$\mathbf{f}_{ei}^{\text{SC}} = \int_{\Gamma_e^{\text{C}}} \mathbf{t}^{\text{SC}}(\mathbf{x}) \Psi_i(\mathbf{x}) dA \quad (5)$$

需要注意的是,随着  $c \rightarrow 0$ ,即将式(4)代入式(5)并用狄拉克函数  $\delta$  替代核函数  $W$ ,  $\mathbf{f}_{ei}^{\text{SC}}$  简化为常规的局部表面耦合公式,即

$$\lim_{c \rightarrow 0} \mathbf{f}_{ei}^{\text{SC}} = \sum_{\gamma=1}^{N_e^{\text{W}}} \sum_{a=1}^{N_\gamma^{\text{P}}} -\mathbf{f}_{a\gamma}^{\text{W}} \Psi_i(\mathbf{x}_{a\gamma}^{\text{C}}) \quad (6)$$

上述推导证明文献[12, 17, 18]广泛使用的表面耦合公式为粗粒化表面耦合的一种特殊情况。

### 2.1.2 颗粒运动与均匀化后的宏观速度场

2.1.1节给出了使用CG来均匀化颗粒-结构之间接触力的一般公式。对于颗粒材料整体来说,更多情况下需要通过细观结构和颗粒运动得到相应的宏观场。本节介绍使用CG将颗粒尺度的速度或位移均匀化至宏观FEM模型上。

考虑 $N_p$ 个颗粒,与体积耦合域内的有限单元 $e$ 在空间上重叠。由式(2)可以在耦合区间内任意位置处获得在空间上连续的速度场 $\mathbf{v}^{\text{CG}}$ 为

$$\mathbf{v}^{\text{CG}}(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{a=1}^{N_p} m_a \mathbf{v}_a W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)}{\sum_{a=1}^{N_p} m_a W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)} \quad (7)$$

式中 $N_p$ 为所有耦合颗粒的个数。注意,由于粗粒度函数的有效范围 $c$ 有限,只有在核函数影响范围内的颗粒才会考虑在均匀化计算中。

与式(5)类似,通过对速度场 $\mathbf{v}^{\text{CG}}$ 与有限元形状函数 $\Psi_i (i=1, \dots, N)$ 进行卷积,可得FEM模型单元 $e$ 节点 $i$ 处的颗粒速度 $\mathbf{v}_i^{\text{DE}}$ 为

$$\mathbf{v}_i^{\text{DE}} = \frac{\sum_{a=1}^{N_p} \int_{\Omega} m_a \mathbf{v}_a W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \Psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\sum_{a=1}^{N_p} \int_{\Omega} m_a W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \Psi_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x}} \quad (8)$$

式(8)可以将速度场 $\mathbf{v}^{\text{DE}}$ 传递至FEM的求解空间,方便在积分点上计算耦合力。类似于表面耦合,随着CG宽度的减小( $\lim_{c \rightarrow 0} W = \delta$ ),式(8)简化为常规微-宏传递法则(9)<sup>[15]</sup>,即

$$\lim_{c \rightarrow 0} \mathbf{v}_i^{\text{DE}} = \left[ \sum_{a=1}^{N_p^c} m_a \mathbf{v}_a \Psi_i(\mathbf{x}_a) \right] / \left[ \sum_{a=1}^{N_p^c} m_a \Psi_i(\mathbf{x}_a) \right] \quad (9)$$

使用式(9)定义宏观速度场需要求得每个形状函数 $\Psi_i$ 在任意耦合颗粒位置 $\mathbf{x}_a$ 处的值<sup>[15]</sup>,而式(8)只需要在高斯积分点上操作,后者的代码实现显然更加容易。

### 2.1.3 基于粗粒化的微-宏观传递的一般性

通过比较式(4,6)和式(7,9)的异同,可以发现使用CG均匀化的一般规律,即赋予离散质点或接触点上颗粒运动信息一个空间尺度和均匀化函数,从而得到一个与连续体模型相适应的宏观场,再将这个宏观场通过卷积施加在有限元网格上。由于核函数的影响范围不受单个单元的限制,作用于单个颗粒上的核函数可以将均匀化操作扩展到与该颗粒相邻但不接触或不重叠的有限单元上。如式(9)的 $N_p^c$ 个颗粒的位置严格位于体积耦合单元内,而式(8)中 $N_p^c \leq N_p$ ,即基于粗粒化的微-宏观传递具有非局部特性。

## 2.2 控制方程与耦合项

为了方便处理由颗粒材料碰撞、冲击和刚体运动产生的大位移,本文采用完全拉格朗日公式建立有限元模型的控制方程,以广义胡克定律描述连续体材料的应力应变关系,时间积分则采用隐式Newmark-beta法。目的是获得更高的精度来测试FEM-DEM耦合算法<sup>[19]</sup>。FEM和DEM子模型的时间步长相同,均为粒间碰撞时间 $t_c$ 的1/20。

颗粒尺度的力学行为则通过牛顿第二定律以及颗粒间的接触力模型求解。接触力模型通常包括法向/切向弹簧-阻尼系统,以及控制颗粒间剪切强度的摩尔库伦准则。由于接触力模型需要精确地计算颗粒间接触面积或重叠深度,离散元模拟的时间积分常采用显示Leap-frog方案。

式(5,6)给出了从DEM颗粒施加到FEM网格的节点耦合力公式。此外,FEM网格更新的位置与速度也需要通过内插传递到其在DEM域的副本上,即为颗粒提供位移边界的一组相互连接的三角形刚体上。这些三角形平面与颗粒之间的接触则采用常规的DEM接触算法来计算。

表面耦合只需要更新两个模型的牵引力和位移/速度边界,体积耦合则需要对两个子模型的位移场施加等式约束条件 $\Delta \mathbf{u}_j = \mathbf{u}_j^{\text{DE}} - \mathbf{u}_j^{\text{FE}} = \mathbf{0}$ ,从而推导出两者的耦合项,并且对耦合内两个子模型的控制方程加权平均。具体的推导过程以及权重分配<sup>[17,18]</sup>,本文只给出耦合项的表达式,即

$$\mathbf{b}^c = \epsilon \Delta \mathbf{u}_j \quad (10)$$

$$\mathbf{f}_a^c = -\epsilon \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \Pi_{ia} \int_{\Omega^c} \Psi_i \Psi_j dV (\Delta \mathbf{u}_j) \quad (11)$$

式中 $\Pi_{ia}$ 为位移或速度场微-宏观传递式(8)或式(9)的矩阵表达式, $\epsilon$ 为罚函数的惩罚系数。 $\mathbf{b}^c$ 为通过罚函数推导出的FEM控制方程耦合项,可以看作是一种体积力密度; $\mathbf{f}_a^c$ 为相应颗粒 $a$ 上的体积力。在给定单元-颗粒耦合系统内,由 $\mathbf{b}^c$ 计算出的耦合节点力与 $\mathbf{f}_a^c$ 大小相等且方向相反,确保了耦合系统子模型间的动力平衡。

## 3 数值算例

基于粗粒化的多尺度耦合与传统方法相比的优势在于其可自由定义的空间尺度,使耦合物理场变得更加均匀,微-宏观传递具有非局部(nonlocal)特性。基于粗粒化的FEM-DEM表面和体积耦合方法,可以通过单球在悬臂梁上的滑动和离散-连续体材料模型内部的波传播算例进行验证。本节将通过弹性块冲击颗粒床和体积耦合深度不同的

悬臂梁两个算例,研究耦合系统因表面或体积耦合产生或耗散的能量随时间的变化,并调查粗粒化宽度对耦合系统能量守恒的影响。两个数值算例的材料参数列入表1;FEM和DEM子模型的时间步长均为颗粒碰撞时间 $t_c$ 的1/20。

表1 有限元与离散元模型的材料参数

Tab.1 Constant material parameters of the finite elements and discrete particles

	名称	数值
有限元 (FEM)	弹性模量 $E/\text{MPa}$	100
	泊松比 $\nu$	0
	密度 $\rho/\mu\text{g}\cdot\text{mm}^{-3}$	1309
	单元尺度 $\Delta X/\text{mm}$	400
	恢复系数 $e$	0.5
离散元 (DEM)	单元尺寸与粒径比 $n$	10 (3.1 节) 2 (3.2 节)
	颗粒半径平均值 $R/\text{mm}$	$\Delta X/n$
	颗粒半径标准差 $\sigma_R/\text{mm}$	$0.1R$ (3.1 节) 0 (3.2 节)
	密度 $\rho_g/\mu\text{g}\cdot\text{mm}^{-3}$	2500
	法向弹簧 $k_n/\mu\text{N}\cdot\text{mm}^{-1}$	$E\cdot R$
	切向弹簧 $k_s/\mu\text{N}\cdot\text{mm}^{-1}$	$0.2k_n$
	摩擦系数 $\mu$	1
阻尼比 $\eta$	0.4	
FEM-DEM 耦合系统	颗粒-单元界面弹簧 $k_n^{\text{SC}}/\mu\text{N}\cdot\text{mm}^{-1}$	$k_n$
	体积耦合惩罚系数 $c/\text{Pa}\cdot\text{mm}^{-2}$	1
	时间步长 $dt$	$1/20t_c$

### 3.1 弹性体冲击颗粒床

首先,通过颗粒在悬臂梁上受重力作用的滑动,验证基于粗粒化的表面耦合方法。如图2所示,颗粒受重力在悬臂梁上的运动轨迹与考虑在不同接触点施加集中点力的悬臂梁弯曲(为方便获得解析解,此处悬臂梁不受重力)解析解一致。与常规局部耦合方法相比,采用粗粒化表面耦合方法获得的颗粒运动轨迹明显更光滑,由此可以推断粗粒化也使颗粒-单元间的耦合力场更光滑。

考虑如图3所示的数值算例,检验可变形弹性块在重力作用下冲击颗粒材料时,是否因耦合作用产生多余的能量。弹性块由8个8节点六面体单元构成,在 $t=0$ 时从颗粒上5d处受重力自由下落,在 $t=0.04$ s时冲击颗粒床。耦合模拟开始之前,所有颗粒已经在重力作用下松弛至准静态,颗粒系统的动能-弹性势能比 $E_k/E_p$ 低于0.01。颗粒材料的侧面为周期性边界,底部是半无限刚性墙,耦合模拟初始状态如图3所示。

首先,考虑是否使用粗粒化进行微-宏观传递,即粗粒化宽度为0和10R的情况( $c=10R$ )。

FEM-DEM耦合模型于 $t=0.1$ s时的模拟结果如图4所示。如不采用粗粒化进行微-宏观传递(图4(a)),即每个在耦合面上的接触力按狄拉克函数处理时,弹性块冲击进入颗粒床后不能达到力平衡状态,颗粒与单元间的耦合力不足以抵抗弹性块向下运动的趋势。采用粗粒化进行微-宏观传递时,由于每一个颗粒-单元接触力均在一定耦合半径内施加到了相邻而非单个单元上,弹性体与颗粒床的相互作用在一定时间后已趋于稳定。如图4(b)所示,颗粒床和弹性块速度远小于图4(a)中不使用粗粒化时的速度。

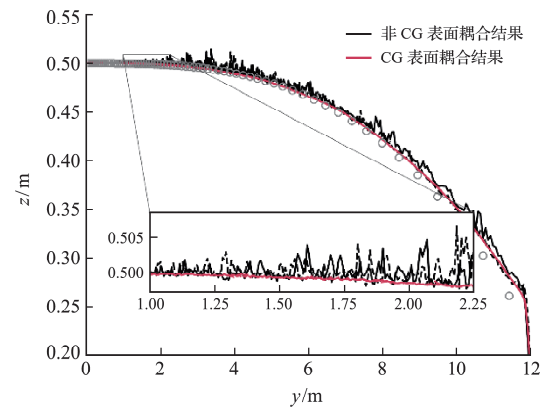


图2 颗粒受重力在弹性悬臂梁上的运动轨迹

Fig.2 Particle trajectory of a particle bending an elastic cantilever under the influence of gravity(with and without using CG)

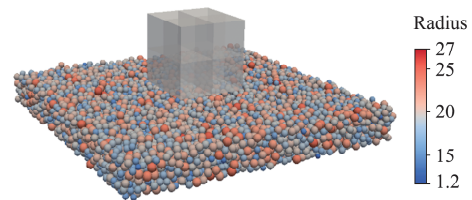


图3 FEM-DEM表面耦合模拟的初始状态

Fig.3 Initial state of the surface-coupled FEM-DEM simulation

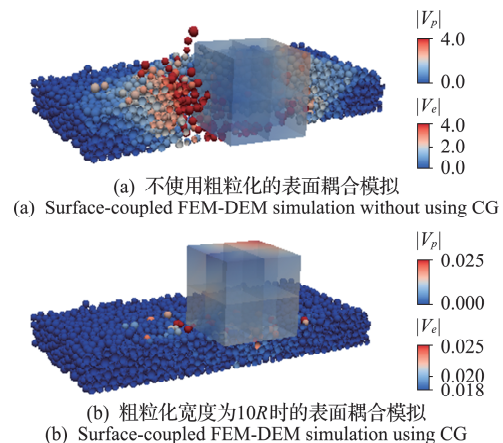


图4 FEM-DEM表面耦合模拟在 $t=0.1$ s的状态( $|V_e|$ 和 $|V_p|$ 分别为8节点有限单元和离散元球形颗粒的速度绝对值)

Fig.4 Surface-coupled FEM-DEM simulations at  $t=0.1$ s ( $|V_e|$  and  $|V_p|$  are the nodal and the particle velocity magnitude, respectively)

### 3.1.1 耦合系统总能量

图 5(a)给出了 FEM-DEM 耦合系统  $z$  方向总动量随时间的变化。与基于 CG 的表面耦合方法相比,常规耦合方法不能有效降低弹性块的动量。尤其是在弹性块冲击颗粒床之后的回弹阶段,正方向的动量最大绝对值与负方向基本一致。采用 CG 表面耦合方法,系统的总动量逐渐减小至零,弹性块-颗粒耦合系统在  $t = 0.1$  s 后快速进入准静态。

图 5(b)展示了粗粒化宽度分别为 0 和 10R 的耦合系统总能量随时间的变化。可以看出,不使用粗粒化操作时,耦合系统总能量从弹性块接触颗粒床  $t = 0.04$  s 时起不断增加,在回弹结束后 ( $t = 0.07$ s) 略微减少,并在二次下落开始时 ( $t = 0.08$  s) 再次增加。由于多余的能量多以应变能形式进入 FEM 子模型,故有限元计算在积累误差到达一定程度后不再收敛。

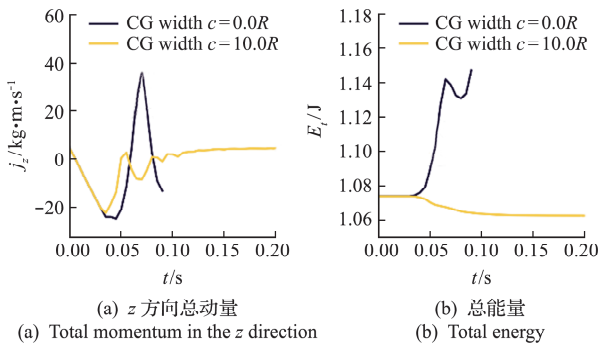


图 5 采用常规耦合和 CG 耦合方法时 FEM-DEM 系统  $z$  方向总动量和总能量随时间的变化  
Fig. 5 Time evolution of the total momentum in the  $z$  direction and the total energy in the surface-coupled FEM-DEM system

使用粗粒化方法耦合时,系统总能量在弹性块接触颗粒床之前和耦合系统达到力平衡状态之后均不发生变化。由颗粒间摩擦产生的能量耗散仅发生在弹性体与颗粒材料间不断调整微观结构至

完成动力松弛 ( $t \in [0.04, 0.14]$  s) 这一阶段。

### 3.1.2 粗粒化宽度对耦合系统能量的影响

为探究粗粒化宽度对耦合结果的影响,本文选取粗粒化宽度分别为 5R, 10R 和 20R。三种情况下,耦合模拟的可视化和弹性块冲击颗粒床后达到力平衡状态的动量和能量变化与图 4 和图 5 类似。限于篇幅,本文不展开讨论。

粗粒化宽度对于耦合系统能量的影响主要体现在应变能和动能上。如图 6 所示,耦合系统应变能和动能随时间变化的每个峰值,随粗粒化宽度增加而逐渐减小。由此可推断,基于粗粒化的表面耦合方法可有效地处理弹性块冲击颗粒床所产生的空间、时间尺度不均匀性,减小计算累积误差,增加耦合计算稳定性。

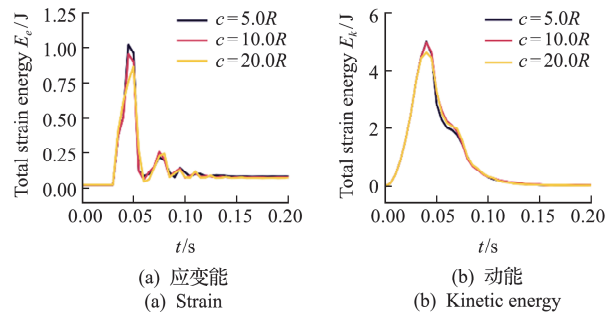


图 6 粗粒化宽度对耦合系统内应变能和动能的影响  
Fig. 6 Effect of the coarse-graining width on the strain and the kinetic energy in the surface-coupled FEM-DEM system

### 3.2 弹性波在离散-连续介质中的传播

采用 FEM-DEM 耦合模型对悬臂梁结构的动力特性进行数值分析,如图 7 所示。梁的右端 FEM 侧节点固定,左端 DEM 侧的颗粒无约束。FEM 和 DEM 子模型均不受重力。颗粒之间拉伸与压缩的弹簧系数相同;按表 1 选取的弹簧系数和几何尺寸可以得到与 FEM 模型一致的材料参数,如弹性模量和泊松比等。

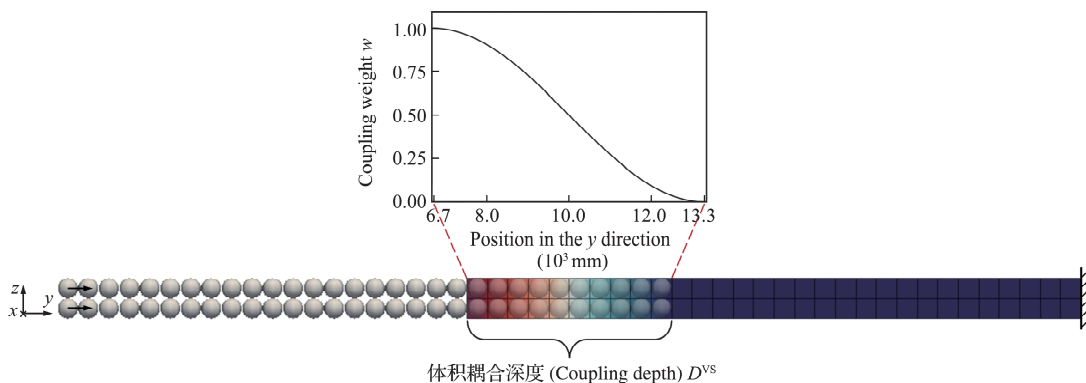


图 7 采用体积耦合方法模拟的悬臂梁(耦合深度  $D^{VS} = 10R$ )  
Fig. 7 An elastic cantilever simulated using the volume-coupled FEM-DEM, with a volume coupling depth of 10 times particle radius

在  $t=0$  时,最左侧一层的颗粒受到初始速度  $v_0=(0,-0.1,0)$  m/s 的瞬时冲击,随后引起的弹性波将从颗粒系统传递到连续体系统,并在一定时间后反射回到颗粒系统。为了简化分析,每一个体积耦合单元内只有一个颗粒与之耦合。与文献[18]不同,本文同时调整两个耦合参数,即体积耦合深度(coupling depth)  $D^{VS}=6R\sim 14R$  和粗粒化宽度(coarse-graining width)  $c=0\sim 2.5\Delta X$ 。对于尺寸相同的 DEM 和 FEM 子模型来说,耦合计算域越大,耦合模型所能描述的整体计算域越小,计算效率也就越低。本节主要分析耦合系统的总能量随耦合深度的变化,而粗粒化宽度作为均匀化的唯一参数,其取值对降低耦合系统能量耗散也是非常重要的。

### 3.2.1 体积耦合系统内弹性波传播的时空演变

由于方向  $y$  的波传播可以考虑为一维问题,本文取每一个  $x-z$  平面内颗粒或节点速度的平均值。以  $D^{VS}=10R$  为例,图 8 给出了各个  $x-z$  平面节点/颗粒平均速度在离散颗粒系统和连续体系统内的时空演变。可以看出,弹性波由 DEM 子模型一端开始传入,至体积耦合区间后,以相同的波速进入 FEM 子模型。两子模型内波传播的波速相同且耦合区域内数值波动较小。由此可验证粗粒化体积耦合算法的准确性。

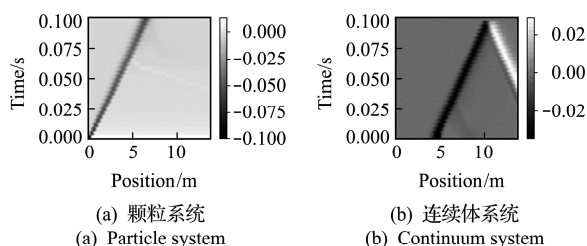


图 8 颗粒系统和连续体系统内弹性波时空演化  
Fig. 8 Space-time evolution of wave propagation in the particle system and the continuum system

### 3.2.2 耦合参数对体积耦合系统能量耗散的影响

图 9 给出了耦合系统( $D^{VS}=6R$ )总能量随时间的变化。当弹性波进入耦合域  $\Omega_c$ ,  $t=0.035$  s 时,耦合系统总能量开始耗散,并在波峰完全离开耦合域  $t=0.055$  s 后结束。可以看出,随着粗粒化宽度的增加,耦合系统的能量耗散与不使用粗粒化情况相比明显减小。针对本节数值算例,取  $c=2.0\Delta X$  或者  $c=2.5\Delta X$  时,可使耦合系统总能量耗散降到最低。

为了更准确地量化耦合系统的能量耗散,本文定义总能量耗散系数  $\Delta E_t/E_t$ 。从图 10 可以看出,  $\Delta E_t/E_t$  随着耦合深度和粗粒化宽度的增加逐渐减

小。在粗粒化宽度增加到最优值时,可以得到相对较小的能量衰减系数。耦合深度和粗粒化宽度均可以调整耦合域动态约束的均匀性,提高罚函数的约束效应。因此,增加耦合深度或者粗粒化宽度均可以得到更好的耦合效果。但增加耦合深度意味着在耦合范围内需要考虑更多的颗粒和单元,这会极大地降低计算效率。因此,更优的做法是,在  $\Delta E_t/E_t$  相同的前提下,选择合理的粗粒化宽度,降低耦合颗粒和单元的数量。

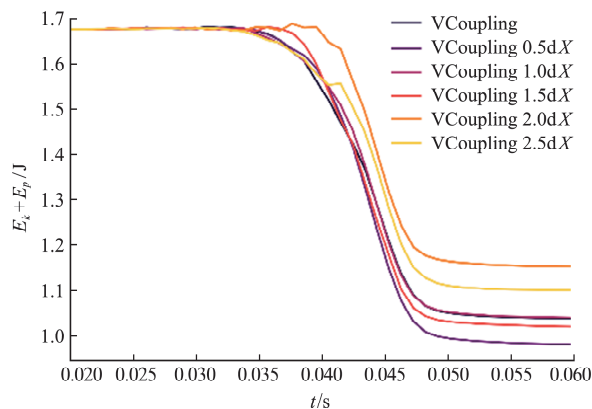


图 9 不同 FEM-DEM 体积耦合系统(耦合深度  $D^{VS}=6R$ , 粗粒化宽度  $c=0\sim 2.5\Delta X$ )的总能量随时间的变化  
Fig. 9 Time evolution of the total energy in various volume-coupled FEM-DEM systems, with a coupling depth of  $6R$  and CG widths ranging between  $0\sim 2.5\Delta X$

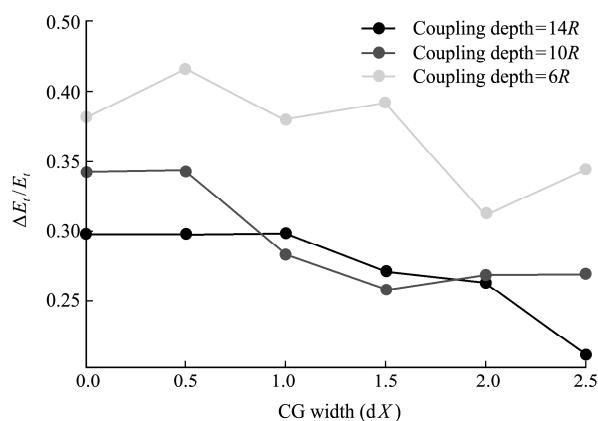


图 10 FEM-DEM 体积耦合系统的总能量耗散系数  $\Delta E_t/E_t$  随粗粒化宽度和体积耦合深度的变化  
Fig. 10 Variation of the dissipated-to-total energy ratio with respect to the CG width and coupling depth

## 4 结论

本文介绍了如何使用粗粒化方法建立颗粒材料及颗粒-可变形构件相互作用的多尺度模型,基于微-宏观传递法则的推导,给出了基于粗粒化的 FEM-DEM 表面耦合和体积耦合公式,解释了为何常规局部耦合是粗粒化耦合的一个极限情况,通过两个数值算例展示了基于粗粒化的耦合方法具有更好的稳定性和更高的效率。主要结论如下,基

于粗粒化的 FEM-DEM 耦合可以通过调整核函数影响范围,使均匀化后的 DEM 宏观场与 FEM 网格相适应;非零的粗粒化宽度使均匀化具有非局部的特性,即单元与颗粒之间不需要直接接触或重叠;较优的粗粒化宽度可以降低数值误差,使耦合模拟效率更高,尤其是在处理多个颗粒与有限单元耦合时可以避免使用较大的颗粒-单元界面弹簧,即很小的时间步长;体积耦合一般需要耦合域范围足够大以确保耦合区间较强的动态约束。合理地增加粗粒化宽度可以在保持相同总能量耗散的条件下,减小耦合域范围,提高计算效率。

综上所述,粗粒化是实现颗粒材料表面与体积多尺度模拟非常方便的数学工具。该方法在体积耦合框架下可描述颗粒材料固态-流态之间的相互转换或者材料发生的复杂物理变化,如 3D 打印等。在表面耦合框架下可解决诸多颗粒流与可变形结构相互作用的工程问题,如单桩安装、油井出砂、堵塞与岩石切割。

## 参考文献(References):

- [1] Luding S, Jiang Y M, Liu M. Un-jamming due to energetic instability: Statics to dynamics[J]. *Granular Matter*, 2021, **23**(4):1-41.
- [2] 季顺迎. 计算颗粒力学及工程应用[M]. 北京: 科学出版社, 2018. (JI Shun-ying. *Computational Granular Mechanics and Its Engineering Applications* [M]. Beijing: Science Press, 2018. (in Chinese))
- [3] Jefferies M G, Shuttle D A. Dilatancy in general Cambridge-type models[J]. *Géotechnique*, 2002, **52**(9): 625-638.
- [4] Darve F, Laouafa F. Instabilities in granular materials and application to landslides[J]. *Mechanics of Cohesive-Frictional Materials*, 2000, **5**(8):627-652.
- [5] Gao Z W, Zhao J D. Constitutive modeling of anisotropic sand behavior in monotonic and cyclic loading [J]. *Journal of Engineering Mechanics*, 2015, **141**(8):04015017.
- [6] Misra A, Pooresolhjouy P. Granular micromechanics model of anisotropic elasticity derived from Gibbs potential[J]. *Acta Mechanica*, 2016, **227**(5): 1393-1413.
- [7] Heussinger C. Shear thickening in granular suspensions: Interparticle friction and dynamically correlated clusters[J]. *Physical Review E*, 2013, **88**(5):050201.
- [8] Jing L, Ottino J M, Lueptow R M, et al. Modified Archimedes' principle predicts rising and sinking of intruders in sheared granular flows[J]. *arXiv*, 2019, **2**(2):022069.
- [9] Liang W J, Zhao J D. Multiscale modeling of large deformation in geomechanics[J]. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2019, **43**(5):1080-1114.
- [10] Liu C Q, Sun Q C, Zhou G G D. Coupling of material point method and discrete element method for granular flows impacting simulations [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2018, **115**(2):172-188.
- [11] Guo N, Zhao J D. A coupled FEM/DEM approach for hierarchical multiscale modelling of granular media [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2014, **99**(11):789-818.
- [12] Michael M, Vogel F, Peters B. DEM-FEM coupling simulations of the interactions between a tire tread and granular terrain[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, **289**:227-248.
- [13] Dhia H B, Rateau G. The Arlequin method as a flexible engineering design tool[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2005, **62**(11):1442-1462.
- [14] Xiao S P, Belytschko T. A bridging domain method for coupling continua with molecular dynamics [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004, **193**(17-20):1645-1669.
- [15] Wellmann C, Wriggers P. A two-scale model of granular materials [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, **205-208**:46-58.
- [16] Goldhirsch I. Stress, stress asymmetry and couple stress: From discrete particles to continuous fields [J]. *Granular Matter*, 2010, **12**(3):239-252.
- [17] Villard P, Chevalier B, Hello B L, et al. Coupling between finite and discrete element methods for the modelling of earth structures reinforced by geosynthetic[J]. *Computers and Geotechnics*, 2009, **36**(5): 709-717.
- [18] Tran V D H, Meguid M A, Chouinard L E. A finite-discrete element framework for the 3D modeling of geogrid-soil interaction under pullout loading conditions[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2013, **37**: 1-9.
- [19] Heil M, Hazel A L. Oomph-lib-an object-oriented multi-physics finite-element library[A]. Fluid-structure Interaction[C]. Heidelberg: Springer, 2006.

## On the conservation properties of CG-enriched concurrent coupling methods for multi-scale modeling of granular materials

CHENG Hong-yang<sup>\*</sup>, Thomas Weinhart

(Faculty of Engineering Technology, University of Twente, Enschede 7500AE, Netherlands)

**Abstract:** Particle and continuum methods are usually coupled to handle particle-structure contact problems and transitional material behavior between discontinuous and continuous. In this work, we reformulate the surface and volume coupling methods based on a micro-macro transition technique called coarse-graining(CG). For surface coupling, coarse graining allows distributing the coupling forces beyond the elements that the particles are locally coupled with, e.g., from contact points to the neighboring integration points. For volume coupling, coarse-graining enriches the homogenization operation with a non-local contribution from the particles. The generalized coupling terms contain one user-defined parameter, namely, the CG width, setting a length scale for the coarse-grained fields. The advantages of CG in surface and volume coupling are demonstrated via two numerical examples: an elastic cube falling on a granular bed and wave propagation between discrete and continuum media. In this paper, we focus on how the conservation properties of the coupled system are influenced by the CG width. Together with other numerical parameters relevant to the coupling, we show that the CG-enriched formulations lead to better numerical stability and less computational cost for a given energy dissipation ratio.

**Key words:** volume coupling; surface coupling; coarse-graining; multi-scale modeling; granular materials

---

引用本文/Cite this paper:

程宏阳, Thomas Weinhart. 关于采用粗粒化提高颗粒材料多尺度模拟守恒特性的研究[J]. 计算力学学报, 2022, **39**(3): 373-380.

CHENG Hong-yang, Thomas Weinhart. On the conservation properties of CG-enriched concurrent coupling methods for multi-scale modeling of granular materials[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2022, **39**(3): 373-380.