

离散元法研究的评述*

刘凯欣 高凌天

北京大学力学与工程科学系, 北京 100871
Email: kliu@mech.pku.edu.cn

摘要 介绍了离散元法的基本理论、计算方法及其应用的现状和最新进展. 从离散元法的离散模型特点及便于甄别与其它数值计算方法的关系的角度给予离散元法一个比较宽松的定义. 在此基础上阐明了离散元方法与刚体-弹簧模型 (rigid body spring model, RBSM) 方法, 不连续变形分析 (discontinuous deformation analysis, DDA) 方法, 分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法, 三维离散元 (discrete meso-element dynamic method, DM²) 方法及无网格方法 (meshless method) 等数值计算方法的关系, 并讨论了离散元法研究中亟待解决的问题和今后的发展方向.

关键词 离散元法, 数值计算方法, 连续介质力学, 非连续介质力学

1 引言

离散元法是 20 世纪 70 年代初由 Cundall 首先提出的^[1]. 最初, 它的研究对象主要是岩石等非连续介质的力学行为, 它的基本思想是把不连续体分离为刚性元素的集合, 使各个刚性元素满足运动方程, 用时步迭代的方法求解各刚性元素的运动方程, 继而求得非连续体的整体运动形态. 离散元方法允许单元间的相对运动, 不一定要满足位移连续和变形协调条件, 计算速度快, 所需存储空间小, 尤其适合求解大位移和非线性的问题.

离散元法自问世以来, 在岩土工程和粉体 (颗粒散体) 工程这两大传统的应用领域中发挥了其它数值算法不可替代的作用. 首先, 在岩土计算力学方面, 由于离散元单元具有更真实地表达节理岩体的几何特点能力, 便于处理以所有非线性变形和破坏都集中在节理面上为特征的岩体破坏问题, 被广泛地应用于模拟边坡、滑坡和节理岩体地下水渗流等力学过程的分析 and 计算中^[2]; 离散元法还可以在颗粒体模型基础上通过随机生成算法建立具有复杂几何结构模型, 通过单元间多种连接方式来体现土壤等多相介质间的不同物理关系, 从而更有效地模拟土壤的开裂、分离等非连续现象^[3,4], 成为分析和处理

岩土工程问题的不可缺少的方法. 其次, 在粉体工程 (过程) 方面, 颗粒离散元被广泛地应用于粉体在复杂物理场作用下的复杂动力学行为的研究和多相混合材料介质或具有复杂结构的材料其力学特性的研究中. 它涉及到粉末加工、研磨技术、混合搅拌等工业加工和粮食等颗粒离散体的仓储和运输等生产实践领域中. 已经有人从不同的侧面对离散元法在上述非连续介质力学问题的研究状况作了较为详细的综述^[2,5,6].

近年来, 离散元法的应用领域又扩展到求解连续介质及连续介质向非连续介质转化的力学问题. 混凝土等脆性材料在冲击、侵彻等动载荷作用下产生的损伤和破坏, 其实质是力学模型从连续体到非连续体的转变过程. 建立在传统的连续介质力学基础上的有限元法等数值计算方法难以直接用于计算和模拟材料具体的破坏形式和破坏的整个过程, 而离散元法在这一方面显示出巨大的生命力^[7,8].

离散元在我国起步比较晚, 但是发展迅速. 王泳嘉于 1986 年首次向我国岩石力学与工程界介绍了离散元法的基本原理及几个应用例子^[9]. 现在, 北京大学, 清华大学、中国科技大学、东北大学、北京农业大学等著名大学和中国科学院力学研究所、中国科学院武汉岩土力学研究所、中国铁道研究院等著名

收稿日期: 2002-10-30, 修回日期: 2003-06-19

* 国家杰出青年科学基金 (10025212) 和国家自然科学基金 (59978005, 10232040) 资助项目

科学研究部门均有人从事离散元法的研究和应用工作, 成果显著.

近 30 年来, 离散元法的应用领域在不断地扩大, 它自身的内涵也发生了变化, 以致于目前很难对离散元法给出一个严格的定义. 下面, 我们从离散元法的离散模型特点及便于甄别与其它数值计算方法的关系的角度给予离散元法一个比较宽松的定义. 数值方法通常将实际具有无限自由度的介质近似为具有有限自由度的离散体 (或网络) 的计算模型 (有限离散模型) 进行计算. 有限离散模型具有三个要素: 单元 (或网络)、节点和节点间的关联. 离散元单元的形状形形色色, 但它只有一个基本节点 (取单元的形心点), 是一种物理元 (physical element). 这种单元与有限元法、边界元法等数值方法采用的由一组基本节点联成的单元 (一般称为网络元, mesh element) 相比有明显的不同. 另外, 离散元法的节点间的关联又具有明确的物理意义, 同差分法等数值方法从数学上建立节点间的关联又有明显的差异. 因此, 我们可以将离散法简单地定义为: 通过物理元的单元离散方式并构成具有明确物理意义的节点关系来建立有限离散模型的数值计算方法. 根据上述定义, 离散元法的家族成员就要大量增加. 这样会更

有利于我们详细地了解离散元法的内涵和外延, 从新的高度总揽离散元法发展和提高的全局.

下面就离散元法的基本原理及当前研究重点和发展趋势进行简要的叙述和分析.

2 离散元法基本原理

2.1 离散模型

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: 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, 如图 1 所示. 块体元中最常用的有 4 面体元、6 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). 颗粒元主要是采用球体元; 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、黏壶 (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.

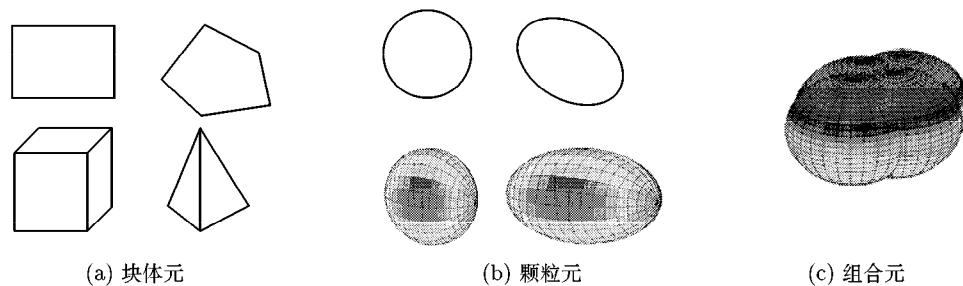


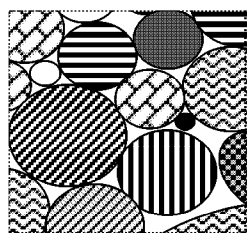
图 1 离散元的单元分类

连接形式在力学机理上可分为接触型和连结型这两大类. 接触型是散体特有的连接形式. 例如, 取一堆碎石的每一块石头或一盘散沙的每一个沙粒为基本单元, 单元间的作用力是接触面 (或线, 点) 上的接触力, 单元间没有变形协调的约束, 节点间的变形元件性质由接触应力同接触变形的关系来确定, 它近似地反映了块体或散体颗粒在接触点或接触面所作用的挤压和摩擦作用. 单元的排列形式一般杂乱无章, 且单元的尺寸、形状乃至材料各异 (如图 2(a) 所示), 因而计算的初始状态往往需要借助 Monte Carlo 法等随机生成器产生. 可见这种处理方法是本着用散体材料的几何复杂性来代替连续介质分析方法的整体材料的本构复杂性的原则建立起来的, 因而它可以比较容易地模拟诸如大变形、非线性以及多物理场作

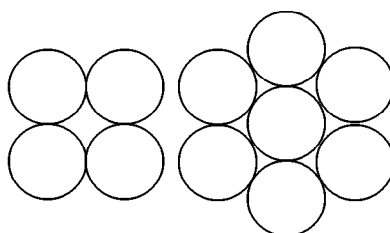
用下散体材料的复杂运动学和力学特性, 如振动或旋转作用下颗粒体的对流运动 (convection motion) 和筛选分离 (segregation) 现象^[10~14], 应力变化所引起的应变链 (strain chain)、剪切带 (shear band)^[15~17] 现象等. 接触型连接单元的力学模型对于块体元主要有弹塑性角 - 边 (或边 - 边) 接触模型, Barton-Cundall 节理模型, Hart-Cundall 节理屈服模型等与速度无关的本构模型及单状态量摩擦本构模型、双状态量摩擦本构模型等与速度相关的本构模型等等. 对于颗粒元也可导出类似于块体元中的与速度无关或相关的本构模型, 文献 [18, 19] 中对此类离散元模型有较为详细的介绍. 总之, 接触型连接形式 (本构关系) 是离散元法的基础和发源地, 适于计算分析散体的力学行为.

连结型连接形式考虑单元间没有间隙且符合变形协调条件,主要是用来处理连续介质力学问题.相比于接触模型,连结型模型的单元一般为规则排列且单元的尺寸相同(如图2(b)所示),材料的变形完全由变形元件来存储和表示.因此这种模型在某种意义上说是一种唯像模型,当模拟连续体的力学行为时单元只表示对连续区域划分的网格,而并不代表真正的几何意义上的离散模型,只有当材料局部发生断裂时两个单元间的网格分离才表示材料的真实分离界面.相对于接触型的连接形式,连结型的连接形式方面的研究很不充分,其研究成果也很少.这主要是由于在一般的连续介质力学问题的数值计算方面离散元法虽然计算精度同有限元法相当,但比起有限元法等计算方法并无算法上的优势,而且还存在着计算量大的缺点.不过对于伴随大变形、刚体运动、损伤和破坏的非线性力学问题,离散元法具有明显的优越性.离散元法的基本节点在单元的形心,只

需实行连接形式从连结型到接触型的转换,不需更换单元就可以实现连续体到非连续体的模型转变.比起构造特殊单元或混合各种算法来实现连续体到非连续体的转换的方法要简单,有效.单纯采用接触型离散元法计算连续介质力学问题或单纯采用连结型离散元法计算非连续介质力学问题是不可取的,将造成不必要的误差.接触型连接方式只能对应于非连续介质(散体)的计算;连续型连接方式只能对应于连续介质(未破坏前)的计算.川井^[20]最先提出了连结型块体离散元模型,命名为刚体-弹簧模型(RBSM),并成功地计算模拟了许多非线性力学问题,碰撞问题和地质动力学问题.森井^[8]提出了连结型圆盘离散元模型, Liu K 等在此基础上提出了连结型正交各向异性圆盘模型^[7]和连结型颗粒元模型(三维)^[21],并验证了它们在计算连续介质力学问题方面的计算精度及计算连续介质-非连续介质动力学问题的实用性.



(a) 接触模型不规则排列



(b) 连结模型规则排列

图2 离散元单元排列形式

上述的离散元模型是不考虑单元本身变形的刚性离散元模型,下面介绍可变形的离散元模型.文献[2]中主要介绍了充分变形块体模型和简单变形块体模型.石根华提出的不连续变形分析(DDA)方法也是一种可变形离散元模型^[22].DDA方法是用许多可互相重叠的有限覆盖网格覆盖整个求解区域,在各个覆盖上用流形方法定义一个独立的覆盖位移函数,从而总体的位移函数就是在几个覆盖的公共部分上局部独立覆盖的加权平均.因此,单元间的关联不仅具有物理意义,还具有数学覆盖的处理.它可计算不连续面的错位、划动、开裂和旋转等大位移的静力和动力问题.

至今为止,块体元模型在描述破坏过程时,破坏只能在单元间发生.因此,单元网络的划分必将破坏状态产生一定的人为干预.对于颗粒元(圆盘)模型来说,只要单元取得足够小,就不会发生上述的情况.

2.2 基本方程

在离散元法中,本构关系体现于力与位移的关系,运动方程为牛顿运动第二运动定律,若使用连结型模型,还要考虑位移符合变形协调关系.而其核心为牛顿运动第二运动定律,即每一个单元在任意时刻都应当满足(参见图3):

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_{j=\xi_i(1)}^{\xi_{in}(ncontact\ i)} f_{ji}^c + f_i^e + b_i \quad (1)$$

$$I_i \frac{d\omega_i}{dt} = \sum_{j=\xi_i(1)}^{\xi_{in}(ncontact\ i)} f_{ji}^{cs} r_{ij} + M_i^0 + M_i^e \quad (2)$$

式(1)为力作用下的运动方程.其中 m_i 为单元 i 的质量; v_i 一般为单元 i 形心的速度矢量; f_{ji}^c 表示与单元 i “接触”的某单元 j 对单元 i 的“接触力”,它可以分解成 i 与 j 间接触线(面)的法向力 f_{ij}^{cn} 和切向力 f_{ji}^{cs} 之和,即 $f_{ji}^c = f_{ji}^{cn} + f_{ji}^{cs}$; f_i^e 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; b_i 为单元 i 的体力.(2)式为力矩作用下的运动方程.

其中 I_i 为单元 i 的转动惯量; ω_i 为单元 i 的角速度, r_{ij} 为单元 j 作用于单元 i 的作用点到 i 形心的距离; M_i^θ 为旋转弹簧产生的力矩; M_i^e 为外力矩; $\xi_{in}(n_{\text{contact } i})$ 为与 i 单元相作用的 j 单元序列号. 法向力和切向力的求解可以根据两单元间的相对位移来求解

$$\begin{aligned} f_{ji}^{cn} &= -k_n \Delta u_{ji}^n + \eta_n v_{ji}^n \\ f_{ji}^{cs} &= -k_s \Delta u_{ji}^s + \eta_s v_{ji}^s \\ M_i^\theta &= -k_\theta \Delta \theta_i + \eta_\theta \omega_i \end{aligned} \quad (3)$$

其中 k_n, k_s 和 k_θ 分别为法向、切向和旋转弹簧弹性系数, η_n, η_s 和 η_θ 分别为法向、切向和旋转弹簧阻尼系数, 它们反映了材料的力学特性. $\Delta u_{ji}^n, \Delta u_{ji}^s$ 和 $\Delta \theta_i$ 分别为 3 种弹簧的变形. 式 (3) 也可以写成积分的形式

$$\begin{aligned} f_{ji}^{cn}(T) &= -\int_0^T k_n v_{ji}^n(t) dt + \eta_n v_{ji}^n(T) \\ f_{ji}^{cs}(T) &= -\int_0^T k_s v_{ji}^s(t) dt + \eta_s v_{ji}^s(T) \\ M_i^\theta(T) &= -\int_0^T k_\theta \omega_i(t) dt + \eta_\theta \omega_i(T) \end{aligned} \quad (4)$$

其中 v_{ij}^n, v_{ij}^s 和 ω_i 分别为法向、切向和旋转弹簧的变形速率. 在实际数值计算时将式 (4) 右端第一项对时间积分项进行数值积分即可, 这样的增量计算形式更便于非线性问题求解. 应当指出的是方程 (3) 与方程 (4) 表明, 离散元方法是通过相对位移和力的关系反映特定材料的本构关系, 具体来说就是通过弹簧的种类和设置方式即单元间的连接模型来反映的, 因而弹簧弹性系数和阻尼系数的选取是离散元算法中的一个重要方面. 单元间接触点的相对速度为

$$v_{ji} = v_{ji}^n + v_{ji}^s = (v_j - v_i) + d_{ij} n_{ji} \times (\omega_i + \omega_j) \quad (5)$$

其中 d_{ij} 为单元间的距离, n_{ji} 为单元法向单位向量, 方向由 j 指向 i . 进一步得到法向和切向相对位移速率为

$$v_{ji}^n = (v_{ji} \cdot n_{ji}) n_{ji}, \quad v_{ji}^s = v_{ji} - (v_{ji} \cdot n_{ji}) n_{ji} \quad (6)$$

由式 (5) 和式 (6) 可以看出单元假设作刚体运动, 单元间法向和切向的相对位移的大小反映了材料的变形 (连续体情况下) 和相互作用 (非连续体情况下), 这反映了材料在发生变形情况下的几何关系.

上述的运动方程 (式 (1)、式 (2))、本构方程 (式 (3)、式 (4)) 以及几何方程 (式 (5)、式 (6)) 构成了离散元法的基本方程. 材料的塑性和破坏可以通过单元间连接元件进行模拟, 即可以用单元间弹簧的

断裂来模拟材料的局部破坏或通过限制弹簧的变形和改变弹簧刚度来模拟材料的塑性行为 [7,55].

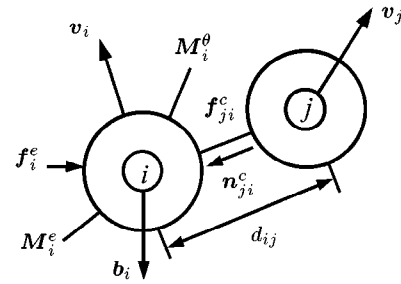


图 3 离散元单元 i 受力和力矩

2.3 求解过程

离散元算法的一般求解过程为: 将求解空间离散为离散元单元阵, 并根据实际问题用合理的连接元件将相邻两单元连接起来; 单元间相对位移是基本变量, 由力与相对位移的关系可得到两单元间法向方向和切向方向的作用力; 对单元在各个方向上与其它单元间的作用力以及其它物理场对单元作用所引起的外力求合力和合力矩, 根据牛顿运动第二定律可以求得单元的加速度; 对其进行时间积分, 进而得到单元的速度、位移. 从而得到所有单元在任意时刻的速度、加速度、角速度、角加速度、线位移和转角等物理量.

离散元法具体的求解过程分为显式解法和隐式解法, 显式解法用于动力问题的求解或动态松弛法 [23] 的静力求解, 而隐式解法用于求解静力问题的静态松弛法 [24]. 动态松弛法是把非线性静力学问题化为动力学问题求解的一种数值方法, 其实质是在上述的逐步积分过程中加入了临界阻尼. 通过质量阻尼和刚度阻尼来吸收系统的动能, 收敛于静态值. 显式算法无需建立像有限元法那样的大型刚度矩阵, 只需单元的运动分别求出, 计算比较简单, 数据量较少, 并且允许单元发生很大的平移和转动, 可以用来求解一些含有复杂物理力学模型的非线性问题. 时间积分一般采用中心差分法. 由于条件收敛的限制, 使得计算步长不能太大, 因而增加了计算时间. 对于使用动态松弛法解决静力或准静力问题时, 阻尼难以确定且对计算数值有所影响. 隐式解法的静态松弛法是直接寻找块体失去平衡后达到再平衡时的力-位移关系, 建立隐式方法解联立方程组, 并通过迭代求解以完全消除块体的残余力和力矩. 静态松弛离散单元法不考虑黏性阻尼, 因而避免了在动态松弛法中确定这些计算参数时所遇到的困难. 但是, 该方法在求解联立平衡方程组时, 有时会出现数值奇异或病态问题, 这是该方法需要进一步改进的地方.

2.4 算法特点

无论采用何种解法或解决何种问题, 离散元的计算过程中主要包括以下几个方面的计算:

(1) 接触判断, 相互作用关系、作用物理量计算 (以相互关系数据为操作对象).

(2) 运动方程判断, 单元物理量的更新 (以单元数据为操作对象).

(3) 计算其它等效物理场的计算 (如应力、应变等).

(4) 计算时间增量, 进入下一个时间步.

在以上的 4 个基本计算方面, (1) 的计算量最大, 耗时最多. 但对于只考虑短程相互作用为特点的离散元法, 其搜索算法也可以进行相应的特殊简化. 具体的实施方法有对邻居列表 (neighbour lists)^[25], 窗口法 (cell subdivision)^[26] 和增量排序更新算法 (incremental sort-and-update algorithm)^[27] 等.

离散元法虽然简单易行, 但是由于求解问题 (特别三维问题) 要求单元数目多、信息量大、计算时间长, 算法的并行化势在必行. 对离散元程序进行并行化, 可以依照 Plimpton 所描述的并行算法的划分方法^[28]; 按单元划分进行并行 (particle decomposition or atom decomposition), 按单元间作用关系进行并行 (force decomposition) 和按空间划分 (spatial decomposition) 进行并行. 但应当注意并行化中的数据同步和处理器效率问题, 尤其要解决好通讯和计算的优化调度问题. 在离散元法并行化方面, Dowding 用 NURBM3DP 程序比较了 SIMD 并行和 MIMD 并行的优劣, 得出了 MIMD 能提供较好的全面并行化的结论^[29]; Schinner 和 Baugh 分别在廉价的内存共享工作站^[27] 和松散连接型工作站网络上^[30] 建立和实施了高效的离散元并行程序.

3 当前的研究重点及发展趋势

3.1 理性化的自身建设

离散元法的研究和应用已有 30 年的历史了, 众多的学者已发表了大量的学术论文和报告. 但是, 从总体上来看, 利用离散元法计算工程问题的应用文章占绝大多数, 而研究离散元法的理论和算法的文章却很少. 而离散元法自它诞生的那天起就带有缺乏理论严密性的先天不足, 当初就有人说离散元法是经验计算. 理论基础的欠缺在块体元模型中尤为明显, 运动、受力、变形这三大要素都有假设 (或简化), 以至计算中力系不能完全平衡. DDA 方法对块体元模型进行了改进, 具有完备的运动学理论, 严格按能量法建立平衡方程, 正确的能量耗散, 具有较高的可靠性. 但是, 单元内部的应力分布 (或应变分布) 的计算精度, 同有限元法尚有差距. 在这个方面

颗粒元模型要合理得多. 只要单元尺寸足够小, 即使计算连续介质力学问题, 其计算精度也可以不亚于有限元法等数值方法的计算精度^[7]. 但是, 这就要在计算量方面做出牺牲. 因此, 优化算法、提高计算效率也是一项重要的工作. 总之, 加强离散元法基础理论、基础算法及误差分析方面的研究, 并汲取有限元法等数值方法的优点, 使之既能保持在描述散体的整体力学行为和力学演化全过程方面的优势, 又能有效描述介质局部连续处应力状态和变形状态, 使离散元法的模型建立真正满足几何仿真, 物理 (本构) 仿真, 受力仿真和过程仿真的原则, 是离散元法研究领域的首要工作. 另外, 通过同实验结果、理论解及其它数值方法的计算结果进行比较, 把握离散元法的计算精度和计算效率, 进而对离散元法的建模和算法进行改进也是必不可少的. 最近, 这方面的工作有所加强.

3.2 跨尺度、跨科学的发展空间

目前已经提到, 颗粒元是离散元法中最活跃, 应用范围最广的单元和模型. 它可大可小: 可以大到石块甚至星球; 可以小到尘埃甚至原子. 特别需要指出的是, 分子动力学 (MD) 在模型上是完全符合本文关于离散元法的定义. 它们的区别在于单元间的关联上: 离散元法主要是用于分析宏观现象, 一般只考虑与对象单元相接触的单元之间的作用力; 分子动力学主要是用于分析原子、分子世界的微观现象, 一般需要考虑对象单元同所有单元间的作用力. 分子动力学模型的提出和应用要比离散元法早, 它是 1957 年由 Alder 和 Wainwright 首先提出并用于研究凝聚态系统的气体和液体的状态方程^[31]. 它适合于在原子和分子尺度下, 模拟皮 (可) 秒 ($1/10^{10}$ s) 时间级别的动力问题. 本文无意将分子动力学划归到离散元法的旗下, 但也不应人为地将它们分为对立的阵营, 它们在算法上完全可以相互补充, 相互促进. 唐志平提出的三维离散元模拟方法 (DM²)^[32] 也符合本文关于离散元法的定义. 该模型中的单元尺寸介于离散元法和分子动力学之间, 元和元之间主要互相作用类似于分子之间作用, 可以用各种形式的作用势来表示, 单元间的作用假设为近场作用. 他将这种离散元方法称为“一种基于准分子动力学的无网格物理模拟方法”. Korlie 也提出了一种类似的模型, 他将分子团方法和经典牛顿动力学结合起来模拟了在重力的作用下水滴在水平固体表面上的成形过程^[33] 和气泡在液体中的上升运动过程^[34].

近年来发展壮大的无网格方法 (meshfree method or gridless method), 如光滑粒子法 (SPH)^[35,36]、改进的光滑粒子法 CSPM^[37]、扩展单元法 (the diffuse element method, DEM)^[38]、无单元的 Galerkin

方法 (the element free Galerkin, EFG)^[39], 再生核质点方法 (the reproducing kernel particle method, RKPM)^[40,41], 云团方法 (HP cloud method)^[42] 等, 与离散元法既区别又有联系. 离散元方法具备了无网格方法的许多特征, 如离散元中的单元信息也只有一个结点 (一般为形心) 承担, 通过单元结点与周围结点发生不同关系来表征不同的物理现象或过程. 它们在模型上主要差别在于: 无网格方法建立在插值理论基础, 也就是用周围结点的数值插值计算中心结点的数值, 其构造的插值函数往往可以采用高阶权函数 (high-order weight functions) 或核函数 (kernel functions), 其实质上是一种数学上的光滑处理, 结点间的联系大多不具有明确的物理意义; 而离散元法中结点间的联系是有明确的物理意义的, 它代表了单元间的相互作用形式和作用大小, 算法的构造是由结点间的连接模型所决定的.

颗粒元的应用现已不仅仅局限于力学领域, 还可以应用于同力学相关的其它学科中. 由于它可以突出表现颗粒的个体性质, 而不象连续介质模型那样过分地依赖于高度简化的、规定性的本构关系, 因而离散元方法在处理复杂颗粒流时表现出较强的效率和适用性^[43]. 它已经被应用于高温下铁离子的液化现象的研究^[44], 模拟生产聚乙烯的化学反应过程中颗粒和气体分布的动态变化过程^[45], 散体在复杂物理场作用环境下的复杂动力学行为^[46,47], 工业和采矿过程的固体颗粒混合和研磨过程^[48], 激光辐照下的失效响应及其机理研究^[32], 含有缺陷的各向异性多项材料在冲击载荷下伴随相变和化学反应的破坏过程研究^[49] 等.

3.3 计算软件的发展

目前开发离散元商用程序最有名的公司要属由离散元思想首创者 Cundall 加盟的 ITASCA 国际工程咨询公司. 该公司开发的二维 UDEC (universal distinct element code) 和三维 3DEC (3-dimensional distinct element code) 块体离散元程序, 主要用于模拟节理岩石或离散块体岩石在准静或动载条件下力学过程及采矿过程的工程问题. 该公司开发的 PFC2D 和 PFC3D (particle flow code in 2/3 dimensions) 则分别为基于二维圆盘单元和三维圆球单元的离散元程序. 它主要用于模拟大量颗粒元的非线性相互作用下的总体流动和材料的混合, 含破损累计导致的破裂、动态破坏和地震响应等问题. Thornton 的研究组研制了 GRANULE 程序, 可进行包括不同形状的干、湿颗粒结块的碰撞 - 破裂规律研究, 离散本构关系的细观力学分析, 料仓料斗卸料规律研究等^[17].

国内离散元软件的开发相对还比较落后, 但随着离散元方法研究在国内的升温, 也出现了用于土木工

程设计的块体离散元分析系统 2D-Block^[50] 和三维离散单元法软件 TRUDEC^[51] 及应用, 以及作者研究小组开发的基于二维圆盘单元和三维球单元为基础的 SUPER-DEM 离散元力学分析系统^[7,21,52].

上述离散元软件还属于专业性很强的专业软件, 在算法、前后处理系统、物态方程及材料数据库方面同有限元法的泛用性商品软件相比还有很大差距, 这方面的工作亟待加强

3.4 同其它算法的融合

有限元法、边界元法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, 如果能将离散元法与有限元法和边界单元法等有机地结合起来, 便能充分发挥各自的长处, 可以极大地扩大该数值方法的范围. 离散元与有限元、边界元耦合算法在文献 [2] 中有详尽的阐述. 近些年来, Mohammadi 等人将离散元有限元耦合模型计算用于分层破坏问题的研究^[53], Ransing 等人用于应用离散和连续建模方法模拟粉末压实过程的研究^[54].

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, 我们还可以利用这一点建立这些算法的统一算法平台. 在前面我们已经讨论了上述算法与离散元方法的异同. 其中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. 也就是说它们具有统一的或相近的数据存储模式和运算机制, 因此完全可以将具有统一特性的众多模型划归于一个统一的计算框架. 不同算法的通用化和统一化所产生的通用计算平台可以大大地扩展算法的应用范围, 为研究诸如传热、传质和化学反应过程相耦合的复杂系统及多尺度问题提供了有力的计算工具.

由此可见, 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.

4 结 论

在计算力学飞速发展的今天, 随着计算机的计算速度和综合性能的不断提高, 新的计算方法层出不穷. 这一方面为我们提供了更多的解题工具和途径, 许多以往不可想象的数值计算工作都得以实现. 另一方面, 要一个一个地熟悉各种计算方法要花费很大的时间和精力. 为此, 本文在综述离散元法的基本原理、基本方法、实际应用的现状和未来的发展趋势的同时, 从有限离散模型三要素的视点, 将几种同离散元基本相同或十分接近的计算方法也作了简单介

绍, 并指出了它们与离散元法的区别和联系. 希望本文能为读者了解和掌握这些计算方法提供便利.

参 考 文 献

- 1 Cundall P A. A computer model for simulating progressive large scale movement in block rock system. *Symposium ISRM*, 1971, Proc 2: 129~136
- 2 王泳嘉, 邢纪波. 离散单元法及其在岩土力学中的应用. 沈阳: 东北工学院出版社, 1991
- 3 Iwashita K, Oda M. Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method. *Powder Technology*, 2000, 109: 192~205
- 4 Tanaka H, Momozu M, Oida A, Yamazaki M. Simulation of soil deformation and resistance at bar penetration by the distinct element method. *Journal of Terramechanics*, 2000, 37: 41~56
- 5 Herrmann H J, Luding S. Modeling granular media on the computer. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 1998, 10: 189~231
- 6 Tsuji Y. Activities in discrete particle simulation in Japan. *Powder Technology*, 2000, 113: 278~286
- 7 Liu K, Zheng W, Gao L, Tanimura S. A numerical analysis for stress wave propagation of anisotropic solids by discrete element method. In: Chiba A, Tanimura S, Hokamoto K, eds. Proceedings of the 4th International Symposium on Impact Engineering. Kumamoto, Japan, 2001-07-16-18. UK: Elsevier Science Ltd, 2001. 589~594
- 8 Sawamoto Y, Tsubota H, Kasai Y, Koshika N, Morikawa H. Analytical studies on local damage to reinforced concrete structures under impact loading by discrete element method. *Nuclear Engineering and Design*, 1998, 179: 157~177
- 9 王泳嘉. 离散元法 — 一种适用于节理岩石力学分析的数值方法. 见: 陈祖煜编. 第一届全国岩石力学数值计算及模型试验讨论会文集. 江西吉安, 1986年6月20~27日. 江西: 西南交通大学出版社, 1986. 32~37
- 10 Cleary, P W. Predicting charge motion, power draw, segregation and wear in ball mills using discrete element methods. *Minerals Engineering*, 1998, 11: 1061~1080
- 11 Dury C M, Knecht R, Ristow G H. Size segregation of granular materials in a 3D rotating drum. High-Performance Computing and Networking. *Lecture Notes in Computer Science*, 1998, 1401: 860~862
- 12 Yang S C, Hsiau S S. Simulation study of the convection cells in a vibrated granular bed. *Chemical Engineering Science*, 2000, 55: 3627~3637
- 13 Yang S C, Hsiau S S. Self-diffusion analysis in a vibrated granular bed. *Advanced Powder Technology*, 2001, 12(1): 61~77
- 14 Antony S J, Ghadiri M. Size effects in a slowly sheared granular media. *Journal of Applied Mechanics-Transactions of the Asme*, 2001, 68(5): 772~775
- 15 Kuhn M R. Structured deformation in granular materials. *Mechanics of Materials*, 1999, 31 (6): 407~429
- 16 Iwashita K, Oda M. Micro-deformation mechanism of shear banding process based on modified distinct element method. *Powder Technology*, 2000, 109: 192~205
- 17 Thornton C, Antony S J. Quasi-static shear deformation of a soft particle system. *Powder Technology*, 2000, 109(1~3): 179~191
- 18 Cleary P W, Sawley M L. DEM modelling of industrial granular flows: 3D case studies and the effect of particle shape on hopper discharge. *Applied Mathematical Modelling*, 2002, 26: 89~111
- 19 徐泳, 孙其诚, 张凌, 黄文彬. 颗粒离散元法研究进展. *力学进展*, 2003, 33(2): 251~260
- 20 川井忠彦, 都井裕. 平面歪问题の离散化解析に対する新しい要素. *生产研究*, 1977, 29(4): 204~207
- 21 Liu K, Gao L. The application of discrete element method in solving three dimensional impact dynamics problems. *Acta Mechniaca Solida*, 2003, 16(3): 256~261
- 22 石根华. 数值流形方法与非连续变形分析. 裴觉民 (译). 北京: 清华大学出版社, 1997
- 23 Otter J R H, Cassell A C, Hobbs R E. Dynamic relaxation. *Proc Int Civ Engrs*, 1966, 35: 633~665.
- 24 Stewart I J, Brown E T. A static relaxation method for the analysis of excavation in discontinuous rock design and performance of underground excavations. Cambridge, 1984. 149~155
- 25 Verlet L. Computer experiments on classical fluids: I. Thermodynamical properties of Lennard- Jones molecules. *Phys Rev*, 1967, 159: 98~103
- 26 Hockney R W, Goel S P, Eastwood J W. Quiet high-resolution computer models of a plasma. *Journal of Computational Physics*, 1974, 14: 148~158
- 27 Schinner A. Fast algorithms for the simulation of polygonal particles. *Granular Matter*, 1999, 2: 35~43
- 28 Plimpton S. Fast parallel algorithms for shortrange molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117: 1~19
- 29 Dowding C H, Dmytryshyn O, Belytschko T B. Parallel processing for a discrete element program. *Computers and Geotechnics*, 1999, 25(4): 281~285
- 30 Baugh J W Jr., Konduri R K S. Discrete element modelling on a cluster of workstations. *Engineering with Computers*, 2001, 17: 1~15
- 31 Alder B J, Wainwright T E. Phase transition for a hard-sphere system. *The Journal of Chemical Physics*, 1957, 27: 1208~1209
- 32 唐志平. 激光辐照下充压柱壳失效的三维离散元模拟. *爆炸与冲击*, 2001, 21(1): 1~7
- 33 Korlie M S. Particle Modeling of Liquid Drop Formation on a Solid Surface in 3-D. *Computers and Mathematics with Applications*. 1997, 3(9): 97~114
- 34 Korlie M S. 3-D Particle Modeling of Gas Bubbles in a Liquid. *Computers and Mathematics with Applications*, 2000, 39: 235~246

- 35 Lucy L B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astronomical J*, 1977, 88: 1013~1024
- 36 Gingold R A, Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars. *Monthly Notices R Astronomy Soc*, 1977, 181: 375~389
- 37 Chen J K, Beraun J E, Jih C J. An improvement for tensile instability in smoothed particle hydrodynamics. *Comput Mech*, 1999, 23: 279~287
- 38 Nayroles B, Touzot G, Villon P. Generalizing the finite element method: Diffuse approximation and diffuse elements. *Comput Mech*, 1992, 10: 307~318
- 39 Belytschko T, Lu Y Y, Gu L. Element-free Galerkin methods. *Int J Num Meth Eng*, 1994, 37: 229~256
- 40 Liu W K, Jun S, Li S, Adee J, Belytschko T. Reproducing kernel particle methods for structural mechanics. *Int J Num Meth Eng*, 1995, 38: 1655~1679
- 41 Chen J S, Pan C, Roque C, Wang H P. A lagrangian reproducing kernel particle method for metal forming analysis. *Comput Mech*, 1998, 22: 289~307
- 42 Gunter F C, Liu W K. Implementation of boundary conditions for meshless methods. *Comp Meth Appl Mech Eng*, 1998, 163: 205~230
- 43 吴清松, 胡茂杉. 颗粒流的动力学模型和实验研究进展. *力学进展*, 2002, 32(2): 250~258
- 44 Kuwagi K, Mikami T, Horio M. Numerical simulation of metallic solid bridging particles in a fluidized bed at high temperature. *Powder Technology*, 2000, 109: 27~40
- 45 Kaneko Y, Shiojima T, Horio M. DEM simulation of fluidized beds for gas-phase olefin polymerization. *Chemical Engineering Science*, 1999, 54: 5809~5821
- 46 Higashitani K, Iimura K, Sanda H. Simulation of deformation and breakup of large aggregates in flows of viscous fluids. *Chemical Engineering Science*, 2001, 56: 2927~2938
- 47 Rhodes M J, Wang X S, Nguyen M, Stewart P, Liman K. Study of mixing in gas-fluidized beds using a DEM model. *Chemical Engineering Science*, 2001, 56: 2859~2866
- 48 Cleary P W, Hoyer D. Centrifugal mill charge motion and power draw: Comparison of DEM predictions with experiment. *International Journal of Mineral Processing*, 2000, 59(2): 131~148
- 49 Tang Z P, Liu W Y. Dynamic multi-pore collapse response with discrete meso-element method. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2001, 35(1): 39~45
- 50 王泳嘉, 宋文洲, 赵艳娟. 离散单元法软件系统 2D-block 的现代化特点. *岩石力学与工程学报*, 2000, 6(增刊): 1057~1060
- 51 王泳嘉, 刘连峰. 三维离散单元法软件系统 TRUDEC 的研制. *岩石力学与工程学报*. 1996, 15: 200~210
- 52 郑文刚, 刘凯欣. 离散元法工程计算软件的前后处理系统. *计算机工程与科学*, 2000, 22(6): 14~17
- 53 Mohammadi S, Owen D R J, Peric D. A combined finite/discrete element algorithm for delamination analysis of composites. *Finite Elements in Analysis and Design*, 1998, 28: 321~336
- 54 Ransing R S, Gethin D T, Khoei A R, et al. Powder compaction modelling via the discrete and finite element method. *Materials and Design*, 2000, 21: 263~269
- 55 Yano K, Horie Y. Mesomechanics of the $\alpha - \epsilon$ transition in iron. *International Journal of Plasticity*, 2002, 18: 1427~1446

A REVIEW ON THE DISCRETE ELEMENT METHOD*

LIU Kaixin GAO Lingtian

Department of Mechanics and Engineering Science, Peking University, Beijing 100871, China

Abstract This paper summarizes the recent progress in theoretical bases, numerical algorithms and applications of the discrete element method (DEM). A more general definition for the DEM is made, by considering the key point of the model and its distinctions from the other numerical algorithms. The relationship between the DEM and the other algorithms, such as RBSM (Rigid Body Spring Model), DDA (Discontinuous Deformation Analysis), MD (Molecular Dynamics), DM² (Discrete Meso-element Dynamic Method), MM (Meshless Method), is explained. The future research topics and development tendency of the DEM are discussed.

Keywords discrete element method, numerical method, continuum mechanics, non-continuum mechanics

* The project supported by the National Distinguished Young Fund (10025212) and the National Natural Science Foundation of China (59978005, 10232040).