

PCDC2D/3D 使用手册

版本： 2023-July



武汉吉美星科技有限公司

ENGINEERING THE FUTURE WITH GEOMECHSIM TECHNOLOGIES

目录

1.0 概述	6
2.0 程序的软硬件要求与安装	7
2.1 软硬件要求	7
2.2 程序安装	7
3.0 快速入门	7
4.0 基本的模型术语及数据结构	12
5.0 程序界面	16
5.1 主菜单	17
5.2 对象树	19
5.3 对象属性	22
5.4 模型视图窗口	22
5.5 脚本编辑器	24
5.6 辅助工具条	25
5.7 进度和状态条	25
6.0 脚本语言	26
6.1 Python 基本语法	26
6.1.1 注释	26
6.1.2 变量和数据类型	26
6.1.3 条件语句	27
6.1.4 循环语句	28
6.1.5 函数	29
6.2 PCDC 命令	29
7.0 PCDC 混合有限元—离散元理论与实例	31

7.1 有限元显式动力学方程.....	32
7.2 有限元单元的力学模型.....	33
7.2.1 单元应变计算.....	33
7.2.2 单元应力及节点力计算.....	35
7.2.3 单元的各向同性线性弹性本构模型.....	35
7.2.4 摩尔-库伦（Mohr-Coulomb）弹塑性本构模型	36
7.2.5 经典 Burgers 蠕变模型	38
7.2.6 边界条件	41
7.2.7 算例一：验证各向同性线弹性本构模型.....	42
7.2.8 算例二：土质边坡工程分步开挖模拟	44
7.2.9 算例三：蠕变模型	47
7.3 接触力计算.....	47
7.3.1 法向接触力计算.....	47
7.3.2 切向接触力计算.....	49
7.3.3 本构模型输入参数	50
7.3.4 算例一：滑块运动模拟.....	50
7.4 节理的内粘聚区模型（Intrinsic Cohesive Zone Model）	52
7.4.1 基本假设与方程.....	53
7.4.2 本构模型输入参数	56
7.4.3 算例一：直接拉裂破坏的模拟.....	56
7.4.4 算例二：钻孔的爆破模拟.....	58
7.5 裂隙流体力学计算.....	60
7.5.1 裂隙流体的压力计算.....	61
7.5.2 流-固（H-M）耦合计算.....	64
7.5.3 本构模型输入参数	64
7.5.4 边界条件输入参数	65

7.5.5 算例一：流体压力下的环向试样中稳定流模拟	65
7.5.6 算例二：裂隙岩体中的稳定流模拟	66
7.5.7 算例三：裂隙中瞬态流模拟	67
7.5.8 算例四：水力致裂的模拟	69
7.6 热力学计算	70
7.6.1 固体单元热传导	70
7.6.2 固体单元边界的热对流	71
7.6.3 固体单元与孔隙流体之间的热对流	72
7.6.4 热-固耦合计算	73
7.6.5 热-流-固耦合计算	73
7.6.6 热-固本构模型及输入参数	73
7.6.7 热-流本构模型及输入参数	73
7.6.8 边界条件	74
7.6.9 算例一：圆环内、外温差下的温度分布和应力响应的模拟	74
7.6.10 算例二：热-固耦合计算模拟	75
7.6.11 算例三：热-流耦合计算模拟	76
7.7 支撑剂运移计算	78
7.7.1 支撑剂运移计算	79
7.7.2 支撑剂-流体-固体耦合计算	81
7.7.3 支撑剂-流-固耦合本构模型及输入参数	82
7.7.4 计算边界条件	83
7.7.5 算例	83
7.8 土壤的水分迁移计算（underway）	83
7.9 支护计算	84
7.9.1 锚杆轴向力计算	85
7.9.2 锚杆剪切力计算	85

7.9.3 锚杆弹塑性本构模型	86
7.9.4 边界条件	87
8.0 PCDC 命令汇总	88
9.0 参考文献	88

1.0 概述

PCDC (Parallel Continuum-Discontinuum Code) 二维(PCDC2D)和三维程序(PCDC3D)是由 GeoMechSim Technologies (武汉吉美星科技有限公司) 历时数年潜心研发的高级数值计算程序。该程序从细观力学角度出发, 采用混合有限元—离散元显式动力学数值计算方法, 结合 GPU 并行计算技术, 不仅可以显式模拟具有各种本构模型材料的静力学及动力学响应, 而且能够用来模拟材料从连续体的变形、裂纹萌生、扩展、乃至非连续体的破坏全过程, 可广泛应用于水电、交通、石油、矿山和材料等领域的科研及工程应用。

PCDC 程序一次安装后可以在 AMD、Nvidia 和 Intel 三种主流 GPU 上进行计算, 目前版本的软件主要功能如下:

- 1) 可以自由定义混合有限元和离散元以及纯有限元计算区域。二维提供三角形单元和四边形单元及混合单元的有限元及离散元计算, 三维提供四面体单元和六面体单元及混合单元。混合有限元和离散元区域的单元采用弹性或粘弹性本构模型, 单元之间采用具有内粘聚区本构模型的节理单元。纯有限元区域则提供线性和各种非线性弹塑性本构模型。这种计算区域的划分能够有效解决混合有限元-离散元方法的实际工程应用。比如硐室周围近场区域可以采用混合有限元离散元, 远场则采用纯有限元计算, 可以在节约计算时间的情况下, 模拟近场实际开挖破裂过程的同时模拟远场力学响应;
- 2) 岩石的破裂过程由裂隙单元的松弛和张裂等显式地模拟, 裂隙单元的松弛和张裂包括张应力破坏模式(模式 I)、剪应力破坏模式(模式 II)或者混合破坏模式。具有抗拉伸强度的 Mohr-Coulomb 准则定义了裂隙单元的屈服, 而屈服后的应变软化过程则由断裂能量输入参数确定;
- 3) 流-固耦合计算: 针对可压缩、粘性流体以及可变形裂隙体的流-固应力全耦合计算。力学计算得到的裂隙几何和张开度分布输入到有限体积流体求解器中, 求解出流体压力场, 然后作为边界条件输入到力学求解器中计算裂隙几何和张开度分布。近似立方定律用于计算裂隙内的粘滞耗散。该流-固应力全耦合模型能模拟由于压力梯度在裂隙网络中的水力流动以及根据流体质量守恒定律模拟随模型孔隙率变化引起的孔隙弹性效应;
- 4) 热-固耦合计算: 可以模拟单元热力学响应及在热流量输入输出情况下材料应力响应及破裂过程;
- 5) 热-流-固耦合计算: 可以模拟热量在节理裂隙流体中传导 (conduction) 和平流 (Advection), 节理内流体和有限元单元之间的对流 (Advectional thermal transfer)、接触单元之间的对流 (Advectional thermal transfer) 以及热量在有限元单元中的传导及应力响应等全耦合过程;
- 6) 可模拟支撑剂运移及相应的水力及应力响应等;
- 7) 可以提供速度边界条件、应力边界条件及各种随时间变化的复杂边界条件输入, 能够模拟任意复杂工况;
- 8) 可以赋初始应力场和根据地质统计数据生成节理裂隙网络;
- 9) 提供弹塑性锚杆支护单元的计算;
- 10) 提供命令行建模和计算, 脚本语言采用命令行与 Python 语言相结合, 可以利用脚本语言非常方便地构建各种复杂计算模型和复杂计算工况, 适合参数化建模计算及参数化研究。也可以利用脚本语言导出各种计算数据。同时脚本语言还提供和软件交互的方法, 可以利用脚本语言生成操作界面。也可以利用 Python 提供的各种高级函数进行数学计算以及对数值计算进行机器学习分析等;
- 11) 流程建模, 提供一些常用的岩石力学建模计算流程, 比如单轴压缩实验、巴西圆盘动态劈裂

试验、硐室开挖破坏模拟、边坡开挖破坏模拟等。流程建模生成的脚本语言能够极大方便用户对软件的使用（高级模块）；

- 12) PCDC 软件还提供自定义本构模型接口，用户不需要任何 GPU 知识即可利用 C#语言编写单元自定义本构模型、以及各种边界条件（高级模块）。

2.0 程序的软硬件要求与安装

2.1 软硬件要求

PCDC 程序目前只能在 Windows 操作系统上运行，其正常运行还需要计算机安装.NET Framework 4.0 及以上版本的软件。在安装 PCDC 过程中，根据计算的软件配置，程序可能会提示安装合适版本的.NET Framework。另外，为了在程序中查看 PCDC 命令的使用说明，需要计算机上安装 Microsoft Edge 的浏览器，可以在 Microsoft 官网下载安装（[Download Microsoft Edge](#)）。由于 PCDC 的并行加速计算需要支持双精度计算的显卡（GPU），因此，需要计算机上安装有合适的显卡。以下是适用于 PCDC 程序计算的最低计算机配置：

- 软件系统：
 - ✓ Window server 2000, Window 10/11
 - ✓ .NET framework 4.0 及以上
 - ✓ Microsoft Edge 浏览器
- 硬件系统：
 - ✓ CPU: >4 核 8 线程
 - ✓ 内存: >32G
 - ✓ 硬盘内存: >1T
 - ✓ 显卡型号：支持双精度浮点运算的 AMD、Nvidia、Intel 或者其他品牌
 - ✓ 显卡内存: >2G

推荐的性价比高的显卡：

- Nvidia: GeForce RTX 3060/3070/3080/4060/4070/4080/4090, RTX A5000/A6000
- AMD: Radeon RX 6600/6700/6800/6900 XT/7900 XT/7900 XTX

建议计算机安装两个及以上显卡，一个显卡用来可视化，另外一个显卡专门用于 PCDC 并行计算。PCDC 程序内可以选择设置用于计算的显卡（在主菜单【Edit】->【Setting】->【Modelling】->【Devices】中可选择用于并行计算的显卡或 CPU）。

2.2 程序安装

点击安装文件 Installation，按照提示选择安装目录即可。

3.0 快速入门

本节通过操作和运行模拟一个常规的单轴抗压强度试验的算例，让用户快速掌握程序的运行步骤和熟悉程序界面的主要功能。具体操作步骤如下：

- 1) 运行程序，得到如图 1 所示主界面；

- 2) 点击【Open an existing project (打开一个已有项目)】，在打开的界面中浏览到程序安装目录下的“Example\Mechanical\UCS\”目录下，选择打开“demo.prj”项目文件 (*.prj 是 PCDC 项目文件后缀)，得到如图 2 所示的项目内容，其中包括：
- 主界面左边窗口内的对象树下的对象列表：Chart(图表)、joint(节理)、element(单元)、Legend(图例)、Axes(坐标轴)等；
 - 主界面右边窗口内的模型视图 (PCDC) 中对应于对象树下的对象的图形显示；
 - 主界面下方窗口内的脚本编辑器中的脚本文件（名称是组合框中显示的“ucs_2d”）
- 3) 点击脚本编辑器菜单项 【Run all (运行全文本)】，程序开始运行脚本文件，包括模型几何及力学参数的设置、建模和计算等，均通过脚本文件进行。如图 3 所示，在程序左下角窗口【console (命令交互控制台)】中可以看到命令输出信息以及模型运行信息。在程序的模型视图中，可以看到模型在 Y 方向的应力云图、以及图表中轴向应力与应变的关系曲线；
- 4) 脚本文件在运行中，可以通过点击命令交互控制台菜单项 【Interrupt execution (中断执行)】中断和停止当前脚本文件的运行；

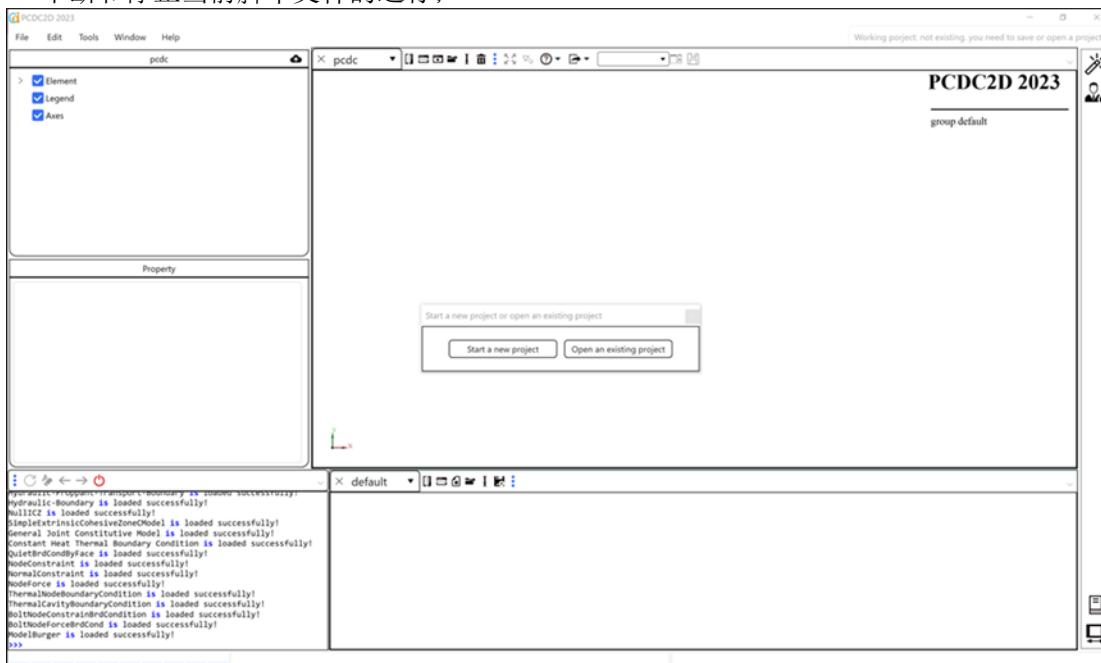


图 1

启动 PCDC 程序后显示的主界面

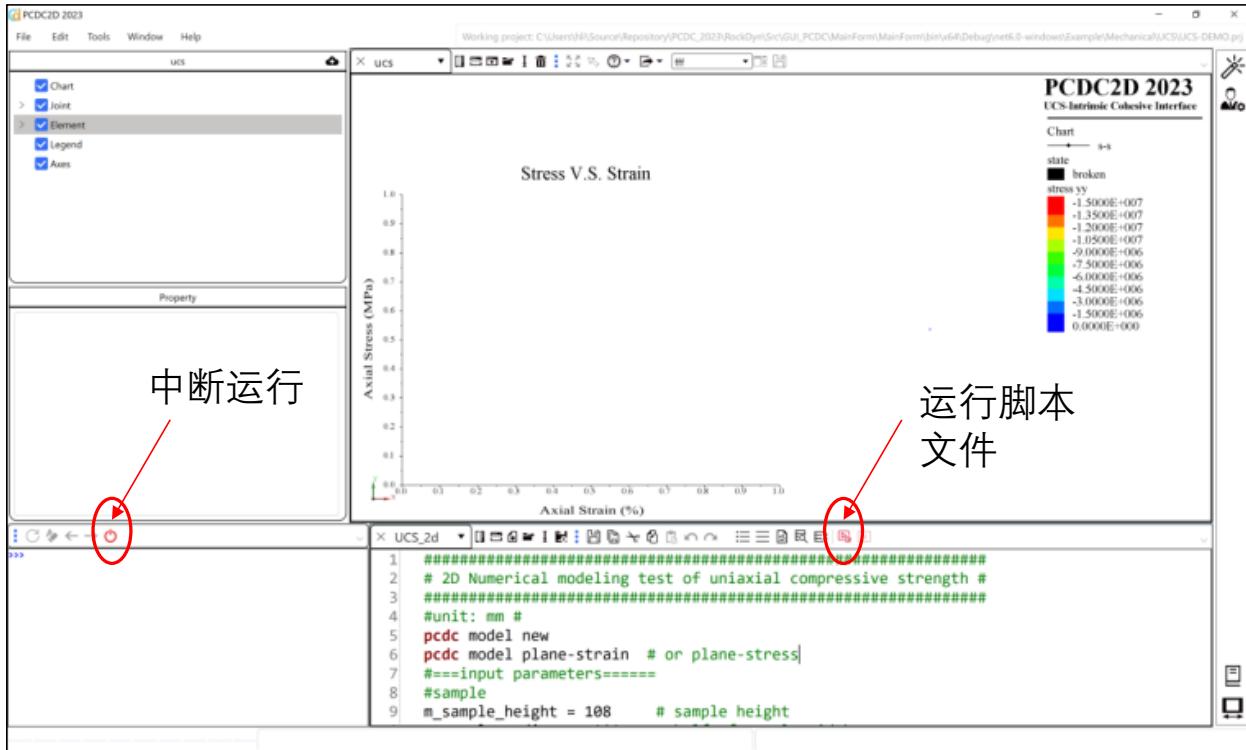


图 2 打开一个项目后的界面，在脚本编辑器的主菜单上点击【运行脚本文件(Run all)】运行打开的脚本文件，也可以点击命令交互工作台上的【中断运行(Interrupt)】中断计算

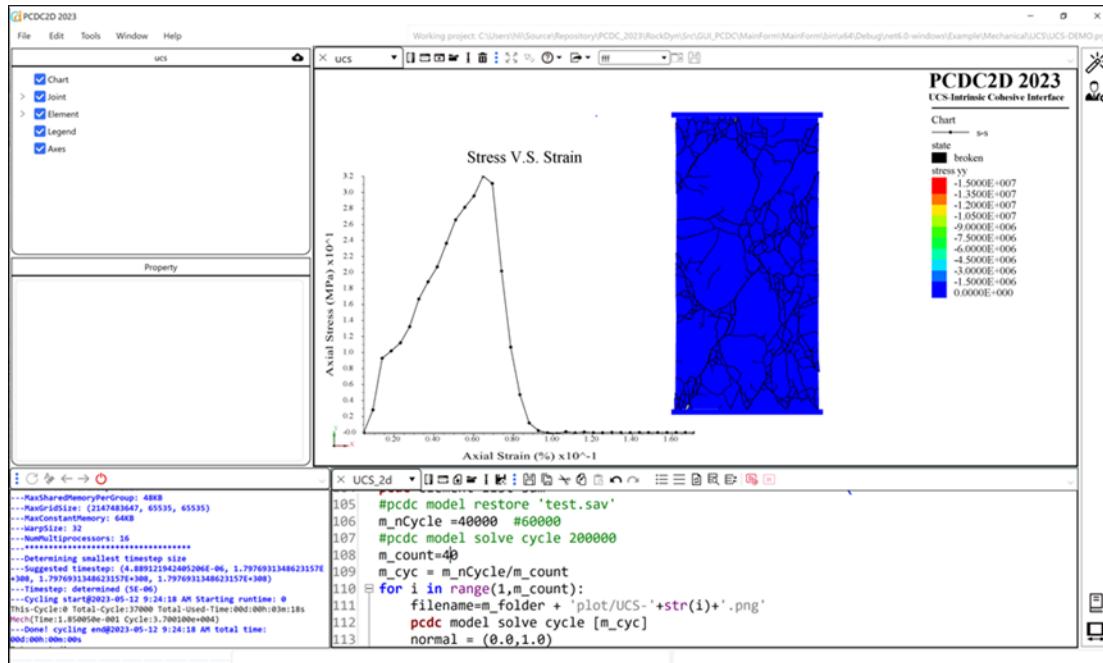


图 3 脚本运行时在【命令交互工作台(Console)】显示运行状况以及在【模型视图(Model view)】中显示模型计算的应力云图以及轴向应力应变曲线

由于 PCDC 主要是通过脚本文件来生成和控制数值计算模型的运行，因此只需要改变脚本文件中的一些模型控制参数，再重新运行脚本文件即可。具体操作如下：

- 1) 修改试验试样大小和模型网格密度：在脚本文件“ucs_2d”中，第 9 和 10 行定义了试样的高度(变量为 `m_sample_height`)和宽度(变量为 `m_sample_radius`)，第 14 行定义了模型网格单元大小(`m_size`)，如图 4 所示。在本模型中，几何尺度取为毫米(mm)级，因此，相应的力学参数等需要根据毫米尺度进行适当的量纲转换来取值。例如，在本例中，加载速度单位应该为 mm/ms，但其值与按米尺度的速度 m/s 是等值的；同样的，抗拉强度按毫米尺度和米尺度在数值上也是相同的，但必须注意，有些单位换算后数值上不相等，比如断裂能等。根据实际试验试样的大小修改 `m_sample_height`(比如 `m_sample=100`)和 `m_sample_radius`(比如 `m_sample_radius=20`)。如果需要减小模型单元大小从而增加网格密度（一般来说，模型单元越小，模拟精度越高），可以修改 `m_size`(比如 `m_size=0.5`)。修改后，重新运行脚本文件即可。

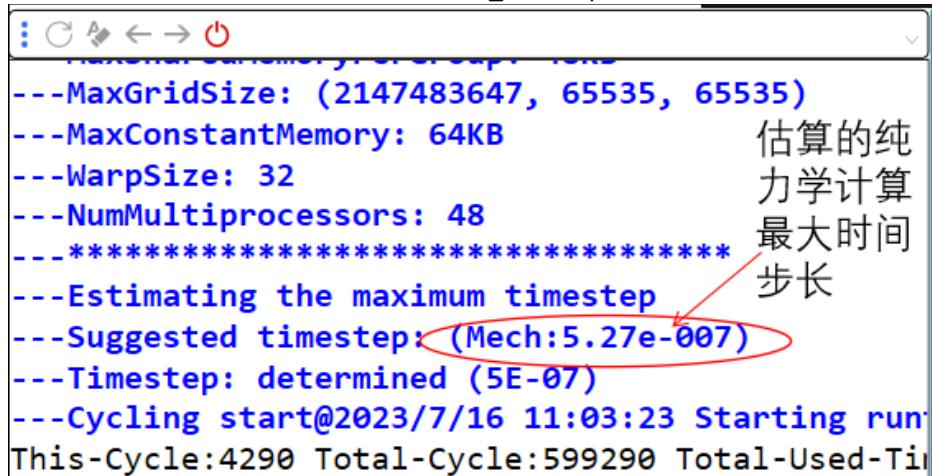
```

7  #====input parameters=====
8  #sample
9  m_sample_height = 108      # sample height
10 m_sample_radius = 52*0.5  # half of sample width
11 #platen
12 m_platen_height = 10      # platen height
13 m_platen_width = 56       # platen width
14 m_size = 2                 # mesh size.

```

图 4 脚本文件“ucs_2d”里模型几何变量的定义截图

需要特别注意的是，由于 PCDC 采用的是显式动力学迭代计算，其中时间步长的设置影响计算的精度及计算的稳定性。如果时间步长太大，计算可能会发散不收敛而失败，在命令交互窗口会自动退出计算并显示“Out of memory”，或者在模型视图窗口看到模型节点位移过大，计算结果失真的现象。如果时间步长过小，计算时间可能又需要太长。通常最大时间步长随输入的模型力学参数和模型剖分单元的大小不同而变化，因此，每一次调整计算参数后都需要试算一次，看看时间步长是否合适。开始计算后，可以查看如图 5 所示的命令交互窗口中的步长信息，比如此次的最大时间步长推荐值是 5.27e-7，那么通常来说，本次计算的时间步长应该小于该值。否则需要中断运行后，重新设定时间步长变量“`m_timestep`”。



```

---MaxGridSize: (2147483647, 65535, 65535)
---MaxConstantMemory: 64KB
---WarpSize: 32
---NumMultiprocessors: 48
---*****
---Estimating the maximum timestep
---Suggested timestep: (Mech:5.27e-007)
---Timestep: determined (5E-07)
---Cycling start@2023/7/16 11:03:23 Starting run
This-Cycle:4290 Total-Cycle:599290 Total-Used-Ti

```

图5：估算的最大时间步长

- 2) 修改试样破裂强度。通过改变“面-节理”或“节理”(face-joint)力学参数来实现：如图 6 所示，第 30 至 37 行定义了节理的粘聚区模型本构关系的力学参数，调整这些参数能够改变单元破裂生成和扩展过程和形态，从而改变试样的宏观单轴抗压强度，比如修改试件的 I 型断裂能和 II 型断裂能($m_i_{gf1}=100, m_i_{gf2}=1000$)，修改后重新运行脚本文件。

```

29 #cohesive interface property
30 m_i_fri=30           # friction angle
31 m_i_coh=10e6          # cohesive strength (Pa)
32 m_i_ten=2e6          # tensile strength (Pa)
33 m_i_gf1=500          # mode I fracture energy (uN/mm)
34 m_i_gf2=5000         # mode II fracture energy (uN/mm)
35 m_i_pen_she=m_s_mod*10 # shear penalty
36 m_i_pen_nor=m_s_mod*10 # normal penalty
37 m_i_pen_ove=m_s_mod*100 # ovelay penalty

```

图 6 脚本文件“ucs_2d”里节理(face-joint)力学参数的定义截图

PCDC 主要通过程序界面的操作来改变模型视图中的显示对象的属性，比如位移和应力云图等。可以尝试如下操作：

- 1) 显示位移云图。通过修改对象属性来显示不同的计算云图：点击选择对象树上的【Element (单元)】，在如图 7 所示的【Property (属性)】界面中，点击展开【Coloring (着色)】，在【ColorBy (着色类型)】组合框中选择【Value (值)】，在下面的【Component (分量)】组合框中选择依次选择【位移(displacement)】和【y】。展开【Contour (云图)】节点，取消勾选【Maximum (最大)】和【Minimum (最小)】选项，从而自动根据模型节点位移值定义云图中最大和最小位移 Y 值。

1)

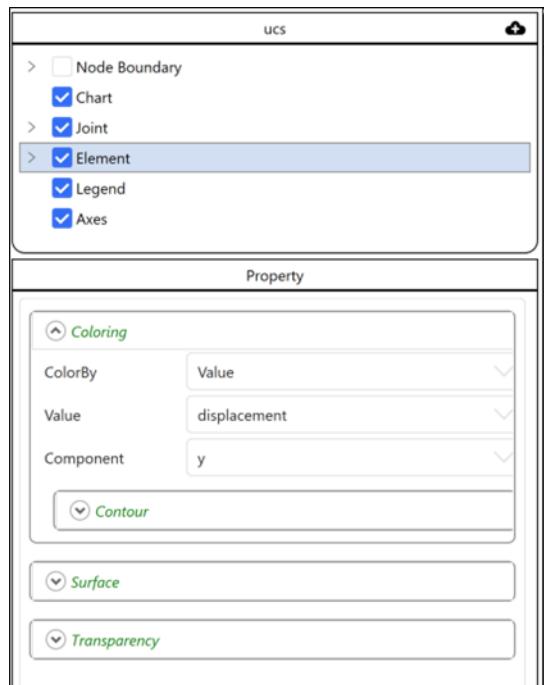


图 7 对象属性菜单

- 2) 显示节点位移约束(边界条件)。需要新增显示对象: 如图 8 所示, 在对象树界面中点击【 Add an object to display (增加显示对象)】, 在打开的界面中选择【Node Boundary (节点边界)】并点击【Ok (确定)】, 一个省缺名为 Node Boundary 的节点边界对象添加到对象树上, 点击选择该对象, 在对应该对象的属性界面中改变着色(Coloring)和点的大小【Point->Size】, 即可在模型视图中看到在脚本文件中通过命令施加在上、下加载板上的位移边界节点, 如图 9 所示。

点击展开模型视图菜单项【 Query... (查询)】, 选择【 info (信息)】, 鼠标移动到节点约束点处, 可以查询到节点的详细信息, 包括节点编号、坐标值、位移值以及赋予的边界条件(模型)等, 当信息显示出来时, 双击鼠标左键可以将显示出的信息拷贝到计算机系统剪切板上, 之后可以粘贴到文本文件中。

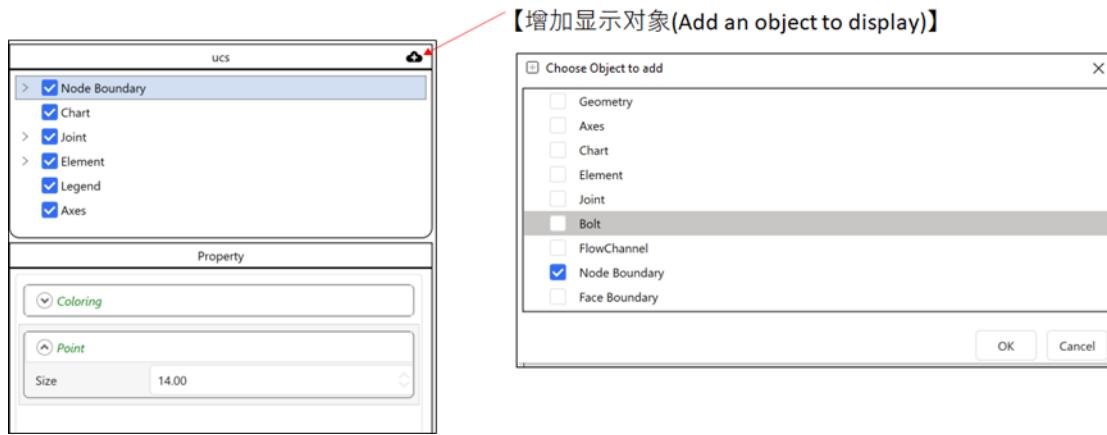


图 8 新增显示对象菜单

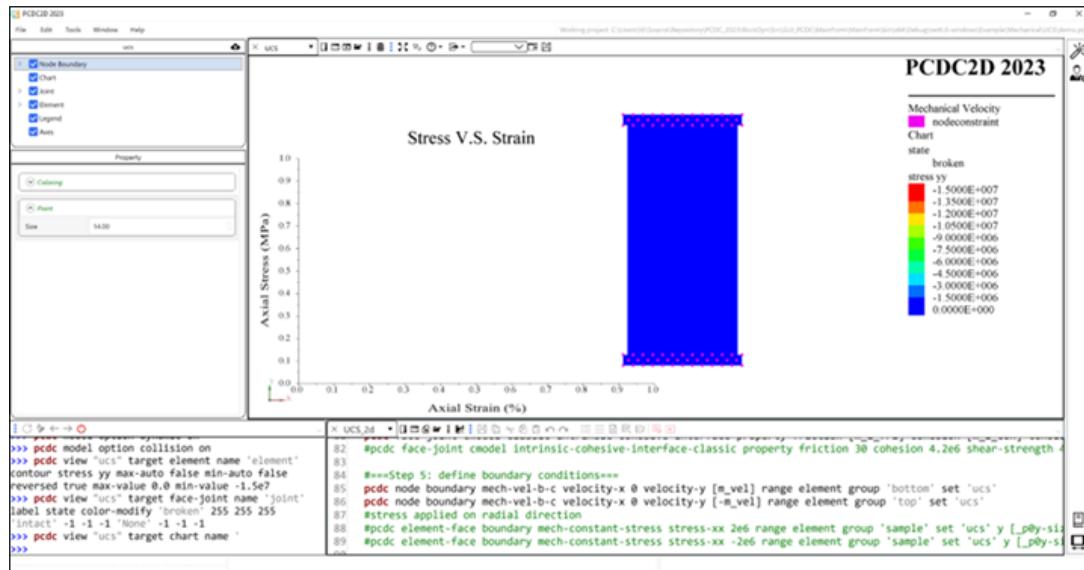


图 9 鼠标查询对象信息

4.0 基本的模型术语及数据结构

PCDC 程序中常用的基本模型术语主要包含:

- 1) 模型 (Model): 如图 10 和图 11 所示, 二维或三维 PCDC 模型均由基本的有限元单元(Element)和

有限元节点(Node)组成;

- 2) 单元(Element): 二维 PCDC 单元包含三个节点 (Node)的三角形单元(Triangle)或者四节点的四边形单元(Quad), 三维 PCDC 单元则包括四节点的四面体单元(Tetrahedron)和八节点的六面体单元(Hexahedron)。在本文中, “单元”、“有限元单元”、“固体单元”均表示“Element”, 除非特指(比如节理单元, 指“节理”)。单元在建模时自动编号(ID), 并且可以赋各种不同的力学或热力学本构关系; 如果程序包含热力学模块或其他模块, 则可以通过赋予不同的本构关系而成为带不同本构模型的单元。
 - 三角形单元(Triangle): 如图 12 所示, 单元①由节点 1、2 和 3 逆时针顺序组成;
 - 四边形单元(Quad): 如图 12 图 13 所示, 单元①由节点 1、2、3 和 4 逆时针顺序组成;
 - 四面体单元(Tetrahedron): 如图 13 所示, 单元①由节点 1、2、3 和 4 组成, 从节点 4 看向单元内部, 节点 1, 2, 3 逆时针顺序;
 - 六面体单元(Hexahedron): 如图 13 所示, 单元①由节点 1、2、3、4、5、6、7 和 8 顺序组成。
- 3) 节点(Node): 如图 14 所示, 每一类单元含不同编号和不同数量的只属于该单元的从节点(Slave node)。相邻的单元与单元之间由节理(Face-Joint)联系在一起, 当多个相邻单元的公共节点在破裂分开前只有一个主节点(Master node), 该主节点将相邻单元共节点的从节点联系在一起, 该主节点是其中一个从节点并由程序自动分配, 当公共节点在破裂分开后, 程序自动搜索共节点的从节点并重新编号和赋予其中之一为主节点。
- 4) “单元一面”或“面”(Element-Face, 或 Face): 如图 15 和图 16 所示, 单元由面构成, 三维四面体单元包含 4 个面, 六面体单元则包含 6 个面; 在二维 PCDC 模型中, “面”实际上是指三角形单元的三个边或四边形单元的四个边。每一个面由若干节点组成, 比如如图 15 所示的二维三角形单元(编号为①)由三个面(编号为 1、2 和 3)逆时针方向组成, 三个面则分别包含两个节点, 如面 1 包含节点 1 和 2(逆时针方向), 面 2 包含节点 2 和 3(逆时针方向), 面 3 包含节点 3 和 1(逆时针方向)。三维情况下, 如图 16 所示, 单元①由面 1、2、3 和 4 构成, 面 1、2、3 和 4 分别包含三个节点, 比如面 1 包含节点 1、3 和 2(从节点 4 看按逆时针方向排列), 面 2 包含节点 2、3 和 4(从节点 1 看按逆时针方向排列), 面 3 包含节点 1、2 和 4(从节点 3 看按逆时针方向排列), 面 4 包含节点 1、4 和 3(从节点 2 看按逆时针方向排列)。
- 5) “面一节理”或“节理”(Face-Joint 或 Joint): 由相邻的两个单元(Element)的面组成。在 PCDC 中, 节理可以是虚拟的, 也可以是实际存在的裂纹, 但在建几何模型时, 节理的这两个面必须共节点, PCDC 根据单元所赋的本构模型, 能在计算时自动确定是否复制分开节理的节点。在二维情况下, 如图 15 所示的节理由面 3 和 4 组成, 包含节点 3、1、4 和 5(逆时针顺序)。在三维情况下, 如所示的面一节理由面 4 和 5 组成, 包含节点 3、1、4(从不含在内的单元的另外一个节点看为逆时针顺序排列)以及对于节点 6、5 和 8。节理单元在破裂前或破裂后可以作为虚拟的或实际的流通道(Flow Channel), 赋予流体力学本构关系进行流体力学计算。
- 6) 接触面(Contact): 不共节点的面或破裂分开的节理之间可能由于接触而产生接触力, 如图 15 所示的试验试样和加载板之间的接触面。接触面之间的接触力的计算根据面被赋予的接触本构关系确定。
- 7) 边界条件(Boundary condition): 也称为约束条件, 包括节点边界条件(Node Boundary)和面边界条件(Face Boundary)。不同的边界条件由给定的不同名称的边界条件赋值。
 - 节点边界条件: 比如速度、加速度边界条件, 加载力边界条件; 热力学计算包含节点温度边界条件; 流体力学计算则包括流节点(flow node)的水压力和流量等边界条件;
 - 面边界条件: 比如应力边界条件; 热力学计算包含面的热流量等边界条件;
- 8) 初始条件(Initial condition): 指单元初始应力、节点初始温度、流体初始压力等, 在计算中需要根据实际情况赋值。
- 9) 几何(Geometry): 指各种几何形状, 比如线段, 多边形等, 可以通过 pcdc 命令绘制或从其他

软件导入到 PCDC 中辅助建模。

- 10) 本构关系(Constitutive model): 指单元的应力应变关系、温度热流量关系、以及节理中的流体压力与流量之间的关系等，不同名称的本构关系可以赋值给相应的单元或节理单元。
- 11) 范围(Range): 用来定义模型单元、节点、面或节理等对象的不同部分，目的是方便赋值和可视化。对象范围由类(set)和组(group)定义，组(group)又定义在类(set)中，同一范围的对象在同一类(set)中只能属于一个组(group)，但可以在其他类中属于另外的组(group)。

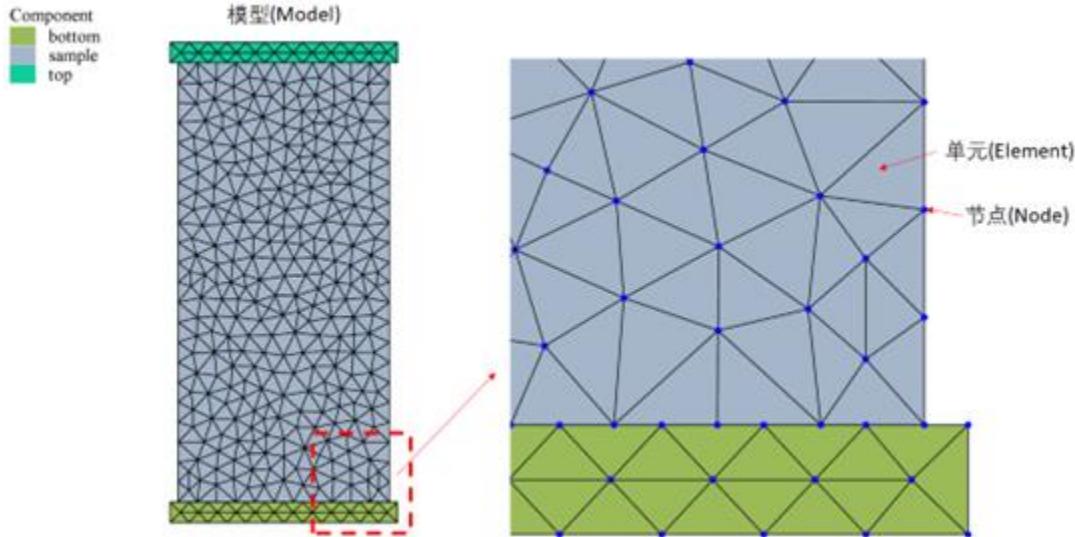


图 10 二维模型(Model) 包含单元(Element)和节点(Node)

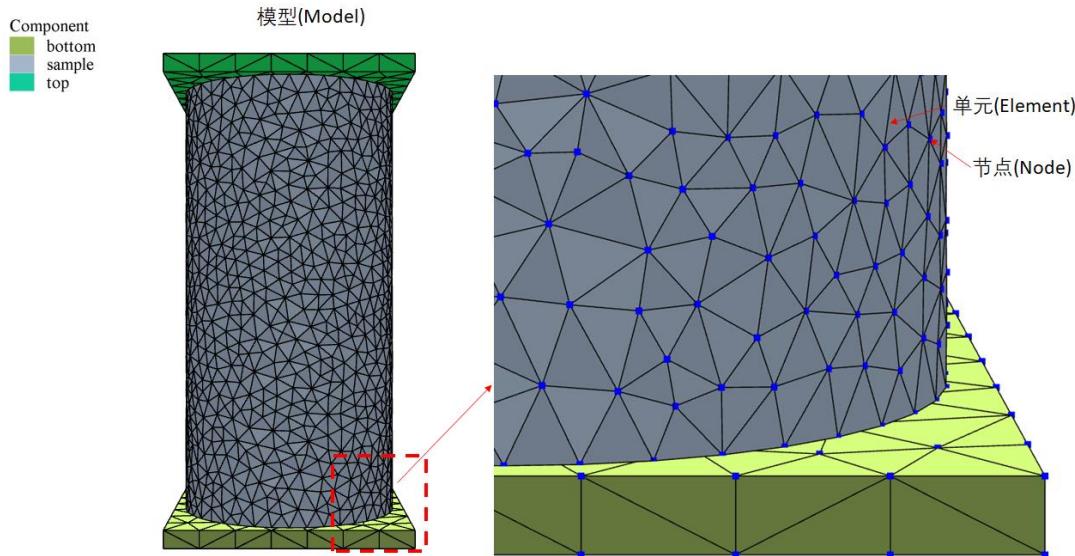
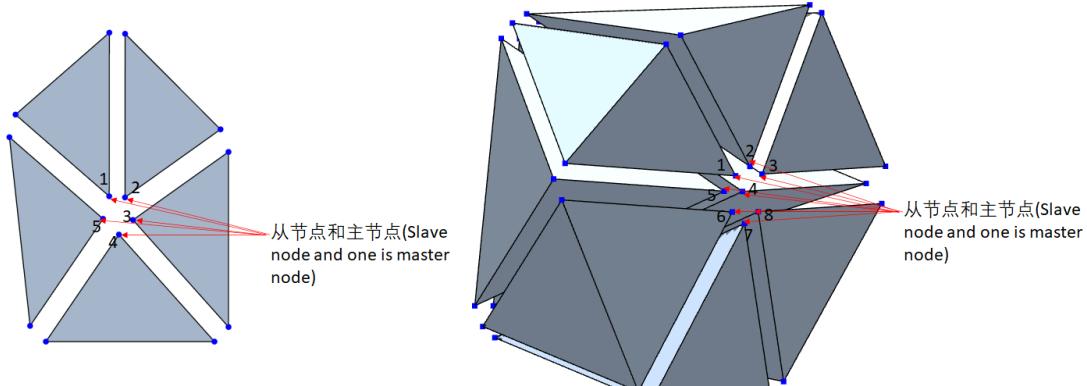
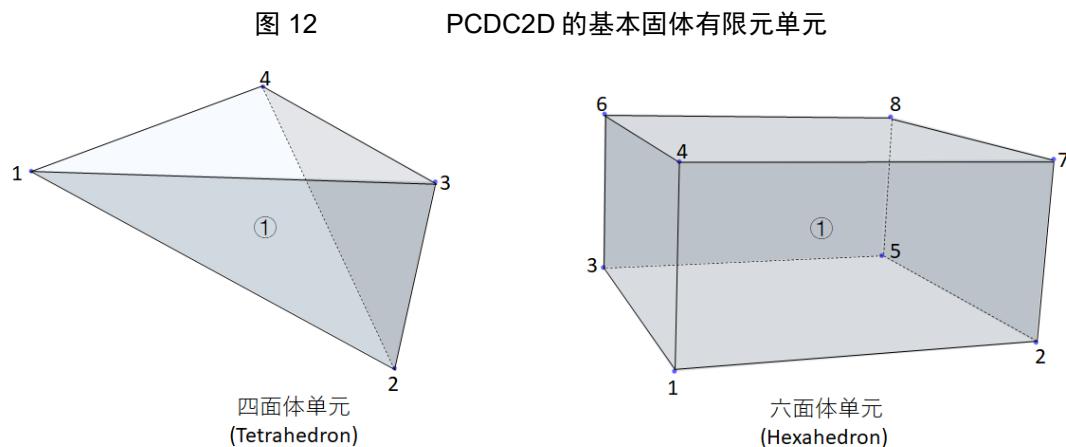
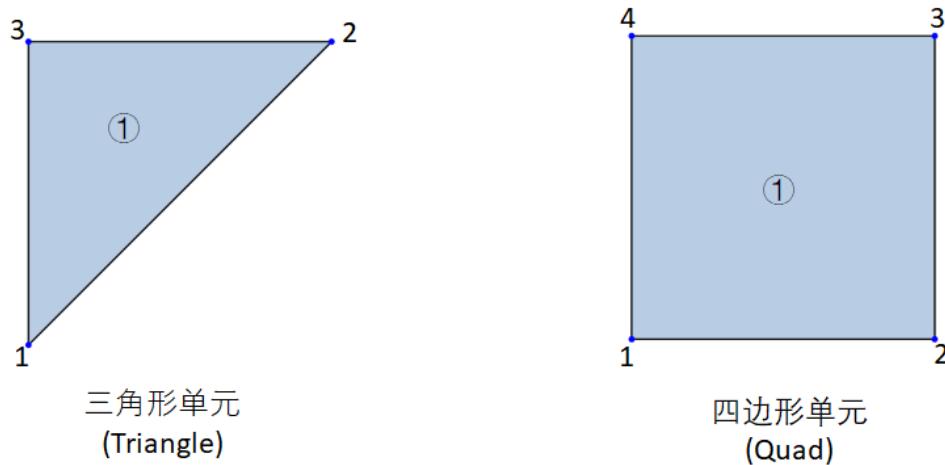


图 11 三维模型(Model) 包含单元(Element)和节点(Node)



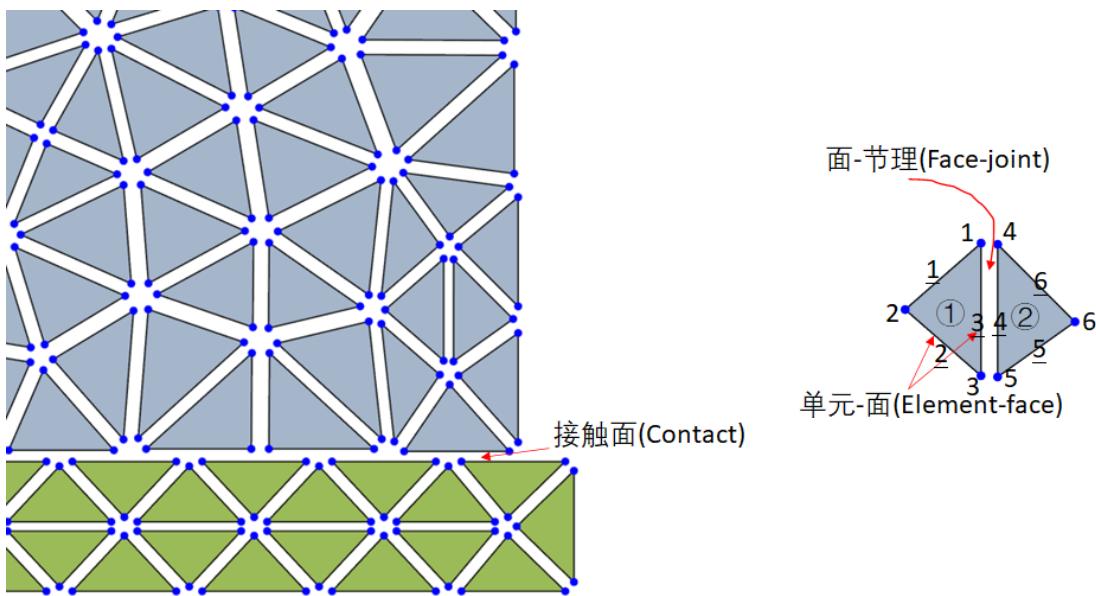


图 15 PCDC2D 有限元单元数据结构

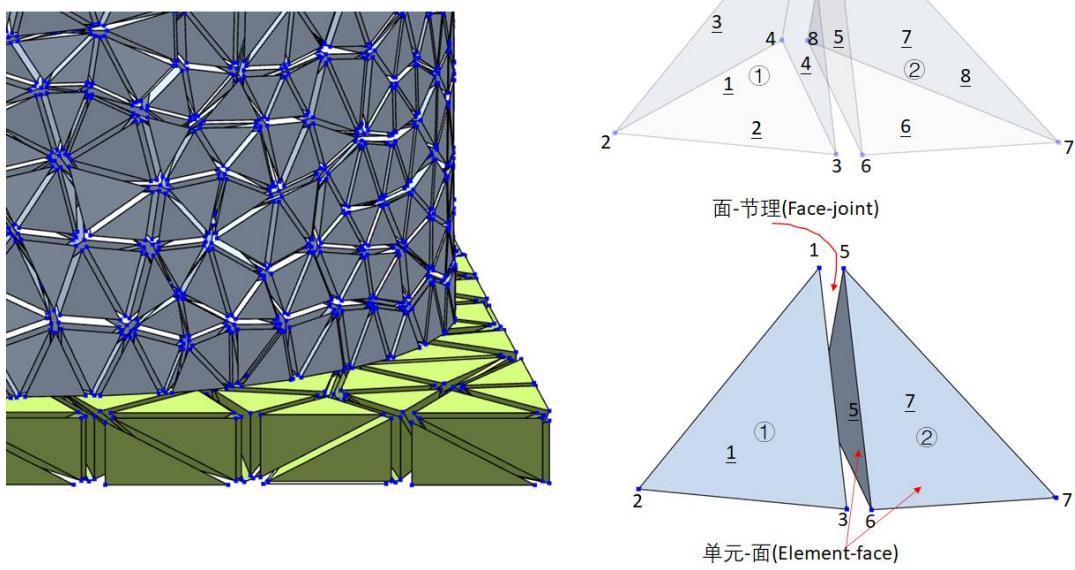


图 16 PCDC3D 有限元单元数据结构

5.0 程序界面

PCDC 程序的主界面如图 17 所示，主要包括主菜单、对象树、对象属性、模型视图、命令交互控制台、脚本编辑器、辅助工具条和进度及状态条等。下面分别详细介绍各部分功能。

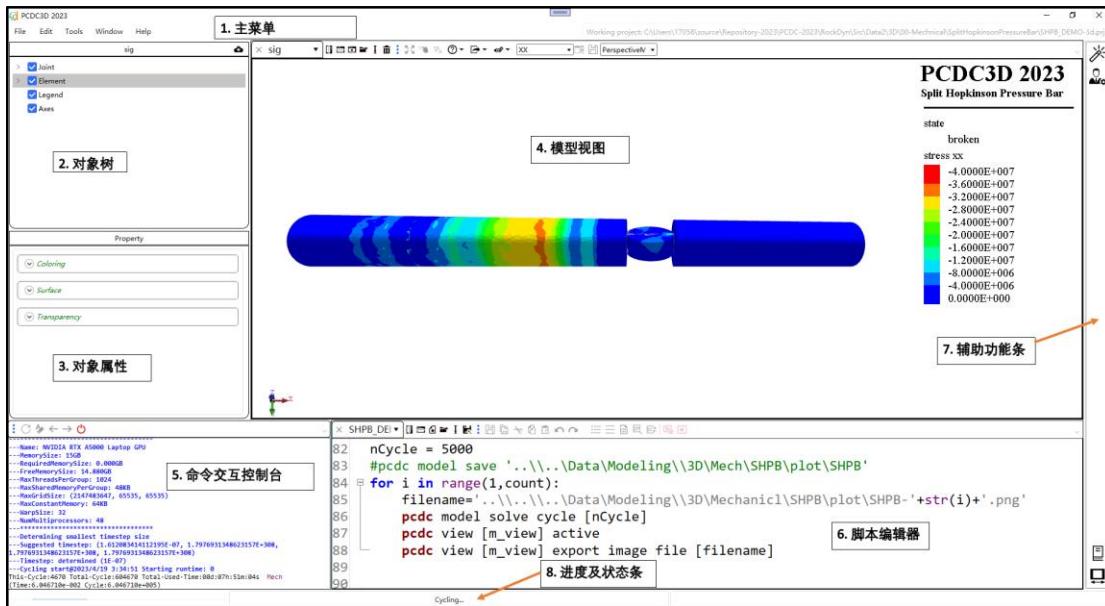


图 17 PCDC2D/3D 程序主界面

5.1 主菜单

主菜单包括的菜单项及对应功能如下：

1) 【File (文件)】菜单，子菜单包括：

- 【New Project (新项目)】：创建一个新项目。项目所在文件目录是程序里脚本文件引用的根目录；
- 【Open Project (打开项目)】：打开一个已有的项目。如果打开的项目无效，则程序默认为省缺的无项目状态；
- 【Save Project (保存项目)】：包存当前项目。如果当前无项目打开，则提示输入项目名；
- 【Save As Project (保存为项目)】：保存当前项目为给定名称和路径的项目；
- 【Open (打开)】：根据文件扩展名，可以打开项目文件 (.prj)、脚本文件 (.sc)、或模型视图文件 (.mv) 等；
- 【New Script (新的脚本)】：创建新的脚本

2) 【Edit (编辑)】菜单，主要用于脚本编辑器，子菜单包括：

- 【Undo (撤销)】：撤销脚本编辑器里脚本的上一次编辑命令；
- 【Redo (重复)】：恢复脚本编辑器里脚本的上一次编辑命令；
- 【Cut (剪切)】：剪切脚本编辑器里被选择的脚本；
- 【Copy (拷贝)】：拷贝脚本编辑器里被选择的脚本；
- 【Paste (粘贴)】：粘贴系统粘贴板里的文本到 PCDC 脚本编辑器里鼠标所在位置；
- 【Setting (设置)】：点击该菜单项，弹出如图 18 所示窗口，包括如下设置：

- ❖ 【Model View (模型视图)】: 包括背景设置和鼠标操作设置
 - 【Background (背景)】: 设置模型视图的背景颜色;
 - 【Mouse Action (鼠标操作)】: 设置在模型视图中旋转、平移、放大、缩小等对应的鼠标键。可根据用户个人的鼠标操作习惯进行设置
- ❖ 【Script Editor (脚本编辑器)】: 对 Script Editor 里的字体进行设置。Script Editor 里字体的大小可以在 Script Editor 里通过鼠标滚动来设置;
- ❖ 【Modelling (模拟计算)】: 选择用于 PCDC 并行计算的 CPU 或 GPU (称为 Devices)。点击选择 Modelling->Devices，在右边的列表中可以看到当前计算机上的 CPU 和 GPU 列表 (如图 19 所示)，以及当前 PCDC 正在用的设备 (在列表中被选中的)。可以选择 GPU 或 CPU 进行计算，如果选中 CPU，则 PCDC 用 CPU 单核进行计算，如果选择 GPU，PCDC 则用 GPU 进行并行计算。如果选择的 GPU 不支持双精度计算，则该 GPU 即使被选中也无法用来计算。

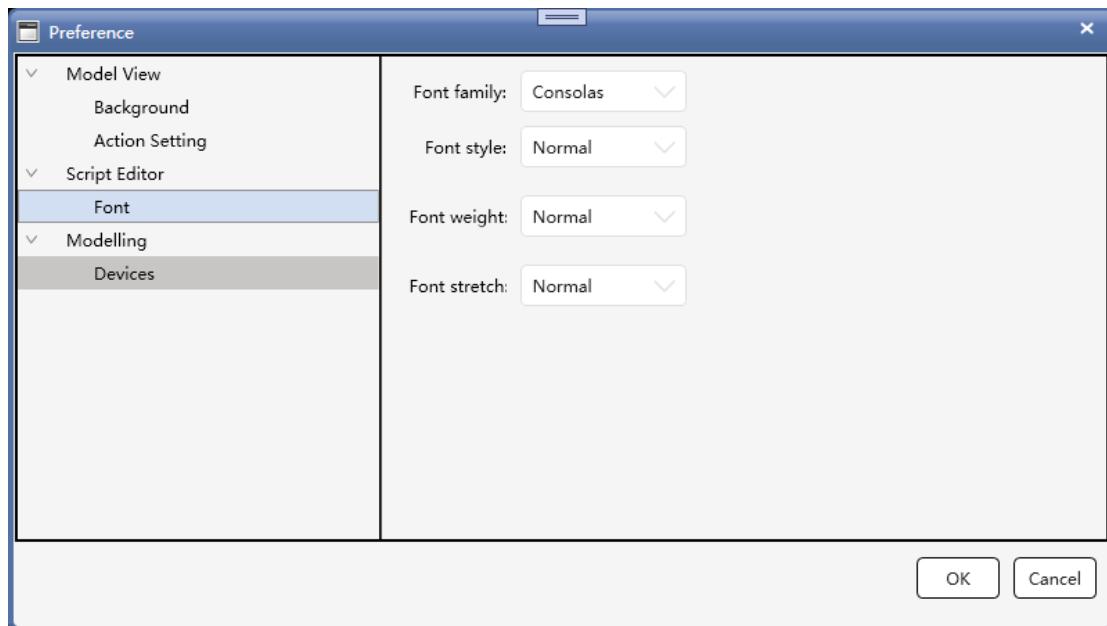


图 18 程序设置窗口

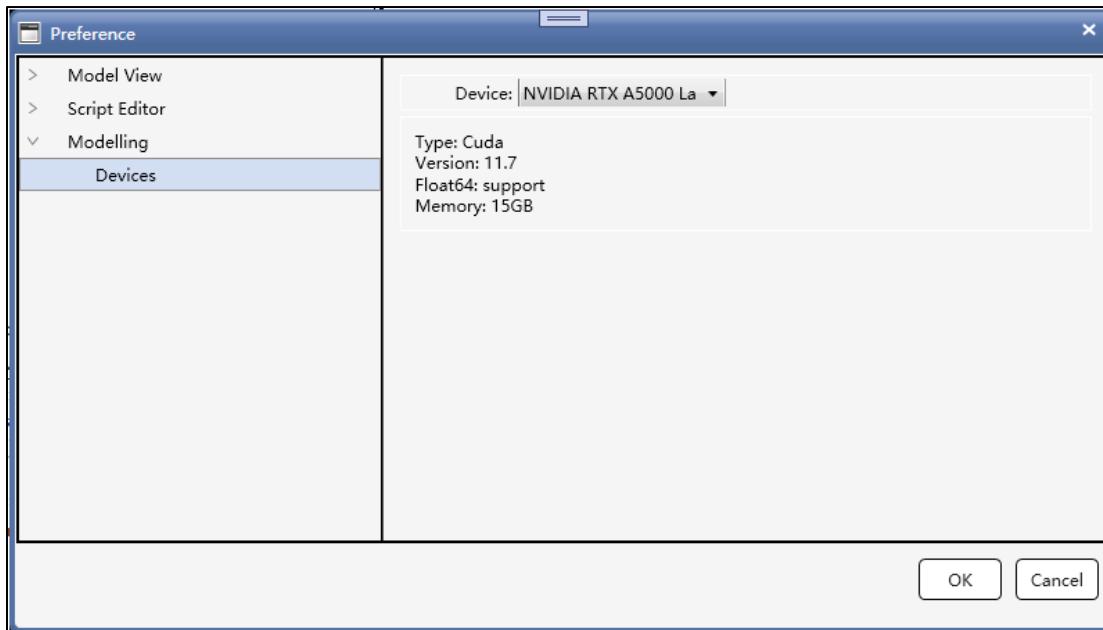


图 19 计算设备列表及选择

3) 【Tools (工具)】菜单, 子菜单包括:

- 【Modelling Wizard (建模向导)】: 包含各种常用工程或试验的建模及模拟向导 (目前版本不支持);
- 【CModel Customization (本构模型定制)】: 用来定制各种本构关系 (目前版本不支持)。

4) 【Window (窗口) 菜单】, 子菜单包括:

- 【Toggle Script Editor (切换脚本编辑器)】: 点击该菜单项, 可以隐藏或显示 Script Editor (脚本编辑器);
- 【Toggle Model View (切换模型视图)】: 点击该菜单项, 可以隐藏或显示 Model View (模型视图区)。

5) 【Help (帮助) 菜单】, 子菜单包括:

- Quick Start (快速入门): 点击自动加载一个快速入门的 PCDC 项目 (见 3.0);
- Manual (手册): 点击可打开本操作手册;
- Online Commands (在线命令说明): 打开查看 pcdc 命令说明。需要保证计算机在联网状态下才能正常打开;
- Support (技术支持): 点击可以看到技术支持邮箱及网站;
- About (关于): 点击可以看到 PCDC 程序版本及包含的可用模块。

5.2 对象树

对象树包含某个模型视图里所有的模型对象。例如, 如图 20 所示, 名称为 temperature 的模型视图包含的对象是 Joint (节理)、Element (单元)、Legend (图例) 和 Axes (坐标轴)。下列操作可以用

于对象树下的对象：

- 1) 显示或隐藏：勾选或不勾选对象在模型视图中显示或隐藏该对象；
- 2) 修改对象属性：选择该对象，该对象的属性在下面属性窗口中显示出来，能够在对象属性中修改对象的属性（参见 5.3）；
- 3) 删除和修改对象名称：除了 Legend (图例) 以外，所有其他对象均可以通过选择该对象，然后点鼠标右键在弹出菜单中选相应选项，如图 21 所示。每个模型视图只能有且只有一个 Legend (图例)，因此不能重命名或删除该对象；
- 4) 过滤对象：如果对象下有 Filter (过滤器)，则表明该对象在模型视图中可以通过过滤来显示，比如需要仅显示部分对象或显示位移大于某个值的部位等，选 Filter (过滤器)，其属性在对象属性窗口中显示，如图 22 所示。通过键入脚本，然后点击 Execute (执行过滤脚本) 来实现对对象的过滤显示。点击 Execute 后，如果脚本有问题，则会弹出错误信息，需要根据错误信息对脚本进行修改。过滤显示必须在勾选 Filter (过滤器) 的情况下才起作用，否则即使已经键入脚本和点击 Execute(执行脚本)，过滤也不起作用（目前版本仅支持部分功能）；
- 5) 增加对象：点击如图 20 所示的【添加模型对象按钮】，弹出如图 23 所示的【Choose Object to add (选择并增加对象)】窗口，窗口中列出了各种类型的对象，勾选需要增加的对象，点击【OK】，则勾选的对象增加到对象树上，对象名称自动生成，保证每个对象在同一模型视图中有唯一的名称。

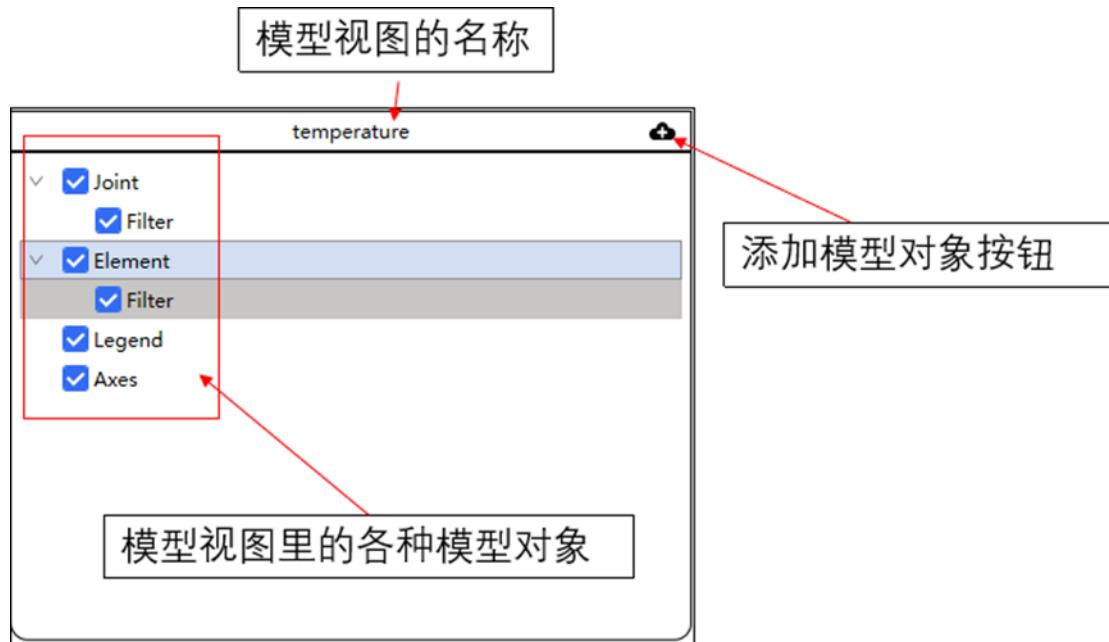


图 20 对象树

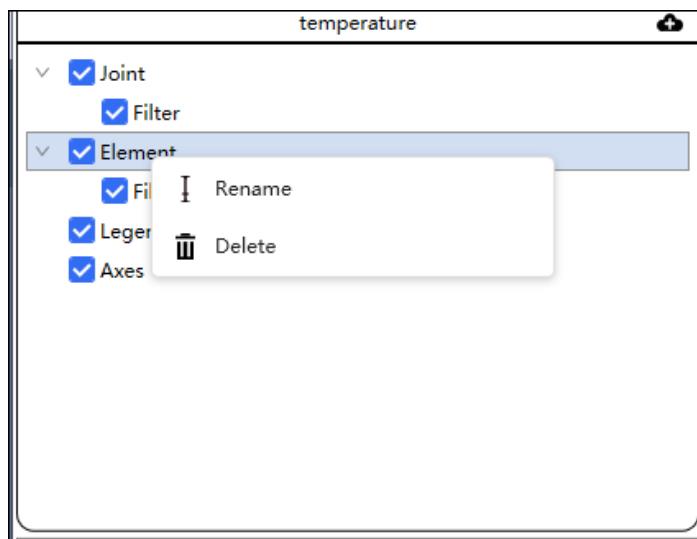


图 21 重命名或删除被选择的对象（选择对象，点鼠标右键弹出菜单）

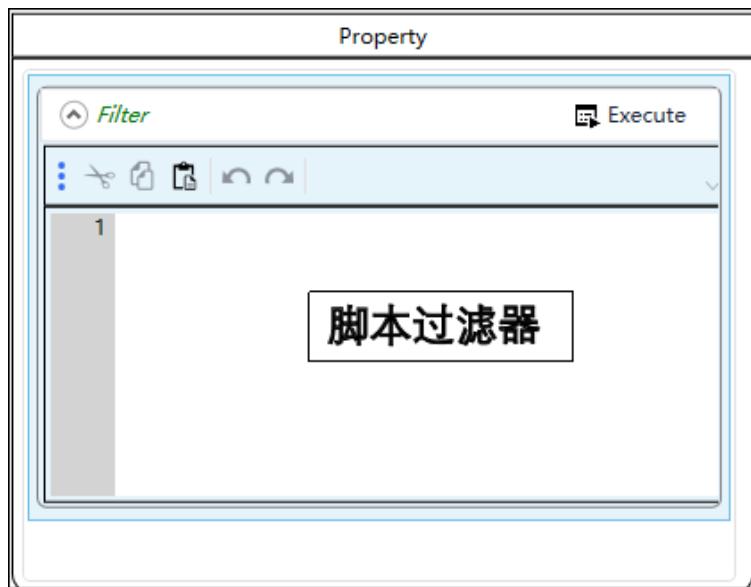


图 22 脚本过滤器（键入脚本，点击 Execute 来过滤显示对象）

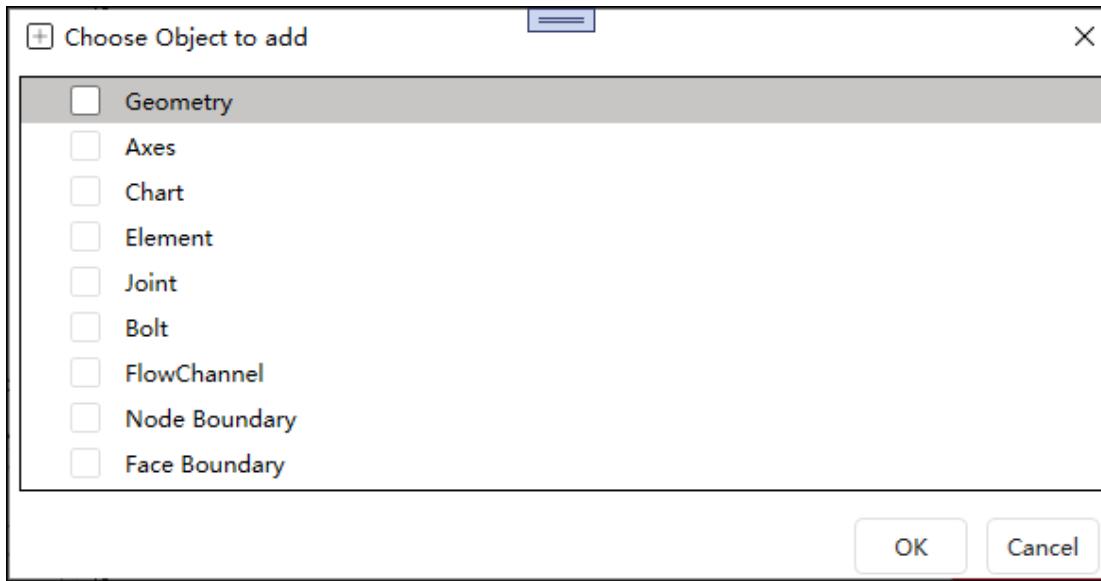


图 23 选择增加对象窗口

5.3 对象属性

选择对象后，其属性在对象属性窗口中显示出来，通过修改对象属性可以改变对象在模型视图中的显示效果。这部分功能比较简单直观，本操作手册不做详细说明。

5.4 模型视图窗口

模型视图窗口用于显示模型视图中的 PCDC 模型，一个模型视图对应一个视图窗口，并包含若干模型对象，模型视图中的模型对象在鼠标点击模型视图窗口后，均列于模型对象树窗口里。多个模型视图可以通过窗口拆分同时显示。模型视图的菜单如图 24 所示，从左到右的菜单项的具体功能说明如下：

- 1) 【视图列表】：所有模型视图均列在该组合框中，选择其中一个，被选中的模型视图显示在该窗口里。其中，有个 default（省缺）名称的模型视图，则不显示任何模型；
- 2) 【水平拆分窗口（Split window horizontally）】：在水平方向把该窗口拆分成两个窗口，每个窗口可以显示不同的模型视图；
- 3) 【垂直拆分窗口（Split window vertically）】：在垂直方向把该窗口拆分成两个窗口，每个窗口可以显示不同的模型视图；
- 4) 【新模型视图（Create a new model view）】：生成一个新的模型视图；
- 5) 【导入模型视图（Open a model view）】：打开和导入一个已有的模型视图，模型视图文件的后缀是 (*.mv)；
- 6) 【重命名模型视图（Rename model view）】：重命名当前窗口中的模型视图；
- 7) 【卸载模型视图（Close model view）】：卸载关闭当前窗口的模型视图；
- 8) 【模型缩放到最大（Zoom to extents）】：缩放模型到最大。如果该菜单项是灰色的（未激活状态），必须鼠标点击该视图窗口才能激活该菜单项的使用；
- 9) 【鼠标一般模式（Normal mode）】：一般是在使用【查询模式】后，需要点击此菜单项恢复鼠标的正常使用；

- 10) 【查询模式 (Query...)】: 可以选择【一般信息查询 (Info)】和【距离查询 (Distance)】, 点击选择【Info】, 鼠标变为“+”, 在视图的模型上移动鼠标, 则可以看到选择部位的模型信息, 显示信息后, 双击鼠标左键, 可以将看到的信息拷贝到计算机剪贴板, 从而粘贴到任何文本文件中; 点击选择【Distance】, 可以通过鼠标点选两点得到两点间的距离;
- 11) 【视图导出 (Export as...)】: 包含三个子菜单项
- 【导出为图形文件 (Image file...)】: 将视图保存为图形文件;
 - 【导出视图图像到剪切板 (Image to clipboard)】: 将视图作为图形保存到系统剪贴板;
 - 【导出视图为 DXF 文件 (Dxf...)】: 将显示的模型导出为 AutoCAD 的 (*.dxf) 格式的文件。

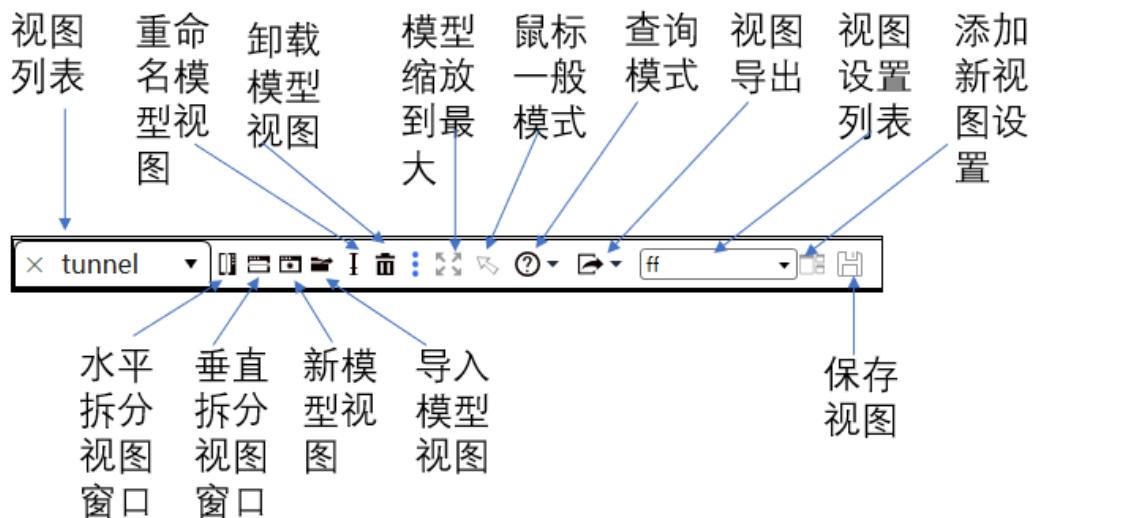


图 24 模型视图菜单

命令交互工作台

用户可以在命令交互工作台上输入 PCDC 命令以及 Python 脚本, 也可以在工作台上得到相应的反馈输出。命令交互工作台的菜单如图 25 所示, 从左到右的菜单项的具体功能说明如下:

- 1) 【重置 (Reset)】: 重置工作台环境, 工作台的历史记录及导入的 Python 函数和模块均被重置为省缺状态;
- 2) 【清除 (Clear)】: 清除工作台的内容;
- 3) 【输入前一个历史记录 (Previous)】: 自动输入上一条历史记录;
- 4) 【输入后一个历史记录 (Next)】: 自动输入下一条历史记录;
- 5) 【中断执行 (Interrupt execution)】: 强行中断和停止当前脚本的运行。

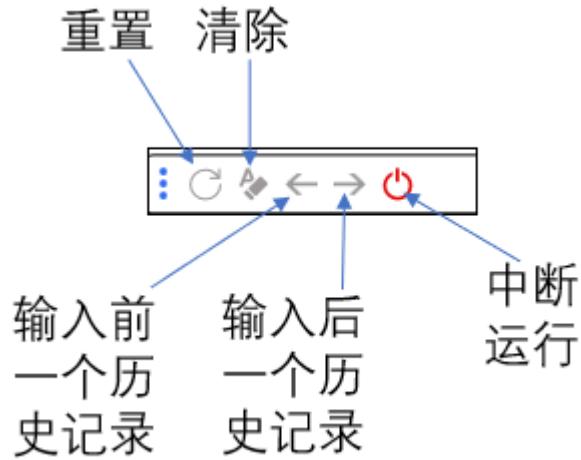


图 25 命令交互工作台菜单

5.5 脚本编辑器

用户在脚本编辑器里编辑和运行脚本。多个脚本文件可以通过窗口拆分同时显示和编辑。脚本编辑器的菜单如图 26 所示，从左到右的菜单项的具体功能说明如下：

- 1) 【脚本文件列表】: 所有导入和创建的脚本文件列表在组合框中，可以选择在当前窗口中需要编辑的脚本文件。其中，有个 default (省缺) 名称的脚本编辑器，则不显示任何脚本；
- 2) 【水平拆分窗口 (Split window horizontally)】: 在水平方向把该窗口拆分成两个窗口，每个窗口可以显示不同的脚本文件；
- 3) 【垂直拆分窗口 (Split window vertically)】: 在垂直方向把该窗口拆分成两个窗口，每个窗口可以显示不同的脚本文件；
- 4) 【生成新脚本 (Create a new script file)】: 生成一个新的脚本文件；
- 5) 【导入脚本 (Open a script file)】: 打开导入一个已有的脚本文件。PCDC 脚本文件的后缀是 (*.sc);
- 6) 【重命名脚本文件 (Rename script file)】: 重命名列表中选择的脚本文件；
- 7) 【关闭脚本文件 (Save and close script file)】: 保存和关闭列表中选择的脚本文件；
- 8) 【保存脚本文件 (Save script file)】: 保存当前窗口中的脚本文件；
- 9) 【保存所有脚本文件 (Save all script files)】: 保存所有列表中的脚本文件；
- 10) 【剪切 (Cut)】: 剪切脚本编辑器中选择的脚本；
- 11) 【拷贝 (Copy)】: 拷贝脚本编辑器中选择的脚本到系统剪贴板中；
- 12) 【粘贴 (Paste)】: 粘贴系统剪切板中的内容到脚本文件中；
- 13) 【恢复 (Undo)】: 恢复脚本编辑器中的上一次操作；
- 14) 【重做 (Redo)】: 重新执行一次编辑器中的操作；
- 15) 【标注 (Comment on)】: 在选择的脚本行前面加“#”，将这些行改为标注行
- 16) 【取消标注 (Comment out)】: 取消选择的脚本行前的“#”，将这些行变为可运行行；

- 17) 【换行显示 (Wrap)】: 自动将比较长的行改为换行显示;
- 18) 【查找 (Find)】: 在脚本编辑器中查找;
- 19) 【查找并代替 (find and replace)】: 在脚本编辑器中查找并替换;
- 20) 【执行全部 (Execute all)】: 执行该脚本文件;
- 21) 【执行选择的脚本 (Execute selected)】: 执行被选择的脚本行。

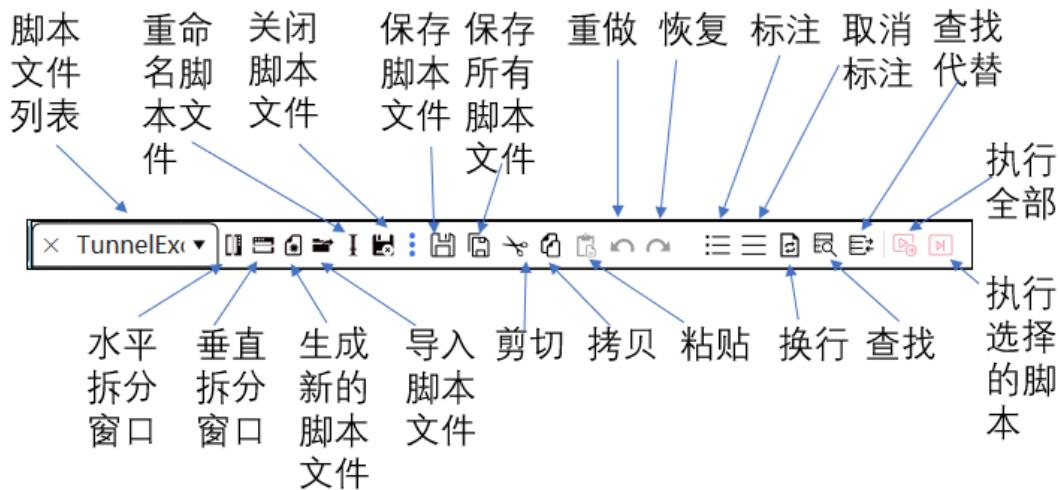


图 26 脚本编辑器菜单

5.6 辅助工具条

辅助工具条上是一些辅助建模计算的菜单项，如图 27 所示。目前具有如下功能菜单：

- 1) 【建模向导 (Modelling wizard)】: 各种建模向导 (目前版本不支持);
- 2) 【定制本构模型 (CModel customization)】: 编写自定义本构模型 (目前版本不支持);
- 3) 【切换脚本编辑窗口 (Toggle script editor)】: 隐藏或显示脚本编辑窗口;
- 4) 【切换模型视图窗口 (Toggle model view)】: 隐藏或显示模型视图窗口。

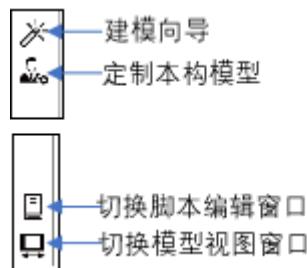


图 27 辅助工具条的菜单

5.7 进度和状态条

进度和状态条如图 28 所示。左边一栏用于显示运行时的进度，中间一栏显示运行信息，右边一栏

显示坐标值。

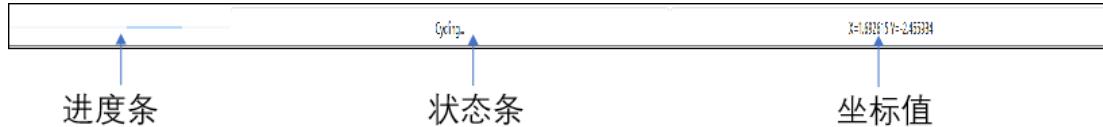


图 28 进度和状态条

6.0 脚本语言

PCDC 脚本语言是 IronPython（版本 2.7）和 PCDC 命令的混合。用 PCDC 命令可以方便建模、划分模型区域、赋本构关系、建立计算边界条件和赋初始值、以及设置计算参数等，IronPython 则可以用来控制计算流程、生成各种辅助建模函数、导入导出数据、调用各种已有的各种功能辅助计算等。IronPython 是一个在 .NET 框架上运行的 Python 实现。它支持大部分 Python 语法规则和标准库，但也有一些限制和额外的功能。详细的 Python 语法规则及常用的 Python 模块可以通过学习 Python 的官方文档或参考其他教程(比如 https://www.w3schools.com/python/python_for_loops.asp)来深入了解。本手册对 Python 的基本语法做简单介绍，并说明 PCDC 在 Python 脚本语言中的一些特殊约定。以下的 Python 示例可以在命令交互控制台逐行键入（加回车），或者在脚本文件编辑器中写入到脚本文件后再全部运行或运行选择部分的脚本行。

6.1 Python 基本语法

6.1.1 注释

在 Python 中，使用 “#” 符号表示单行注释，注释用于解释代码的作用。例如：

```
# 这是一个单行注释
```

6.1.2 变量和数据类型

在 Python 中，可以直接声明变量并赋值，变量的类型会根据赋值自动确定。常见的数据类型有整数（int）、浮点数（float）、字符串（str）、布尔值（bool）等。例如：

```
# 声明整数变量
x = 10
y = 5
# 声明浮点数变量
pi = 3.14
# 声明字符串变量
name = "John"
# 声明布尔值变量
is_true = True
is_false = False
```

```
# 声明 PCDC 矢量(Vector)
# 在 PCDC2D 中
v2=Vector(2.0,2.0)
print(v2.X+ " "+v2.Y)
print(v2)
# 或者在 PCDC3D 中
v3= Vector(2.0,2.0,2.0)
print(v3.X+ " "+v3.Y + " " + V3.Z)
print(v3)
```

需要注意的是，在声明变量时，如果变量名使用前缀 `m_`，那么在用 PCDC 命令保存模型时，这些变量会保存到文件中，在恢复保存的文件后，这些变量无需重新声明，并能够继续使用，例如：

```
# 浮点变量
m_height=20.0
# 整型变量
m_count=10
# 用 PCDC 命令保存模型
pcdc model save 'test.sav'
```

下次重新运行 PCDC 程序并执行如下 PCDC 命令后，保存的变量可以直接使用，例如：

```
# 恢复保存的 PCDC 模型
pcdc model restore 'test.sav'
# 使用保存的变量(前缀为 m_)
new_height = (m_height-10.0)*float(m_count)
print(new_height)
```

目前 PCDC 版本可以利用 `m_` 前缀保存的变量仅限于整形、浮点、字符串、布尔型以及 PCDC 矢量(Vector)。

6.1.3 条件语句

条件语句用于根据条件的真假来执行不同的代码块。例如：

```
# 使用 if 语句判断条件
```

```
if x > y:  
    print("x 大于 y")    #注意: print 前面的 tab  
elif x < y:  
    print("x 小于 y")  
else:  
    print("x 等于 y")
```

6.1.4 循环语句

循环语句用于重复执行一段代码块，Python 提供了 for 和 while 两种循环结构。例如：

```
# 使用 for 循环遍历列表  
fruits = ["apple", "banana", "orange"]  
for fruit in fruits:  
    print(fruit)  
  
# 使用 while 循环打印数字  
i = 0  
while i < 5:  
    print(i)  
    i += 1  
  
# 利用 range() 函数  
for x in range(2, 30, 3):  
    print(x)  
  
# 利用 break 退出循环  
fruits = ["apple", "banana", "cherry"]  
for x in fruits:  
    if x == "banana":  
        break  
    print(x)  
  
# 利用 continue 继续循环  
fruits = ["apple", "banana", "cherry"]  
for x in fruits:  
    if x == "banana":  
        continue  
    print(x)
```

6.1.5 函数

函数是一段可重用的代码块，用于完成特定的任务。例如：

```
# 定义一个简单的函数
def say_hello(name):
    print("Hello, " + name)
# 调用函数
say_hello("John")
```

需要注意的是，在声明函数时，如果函数名使用前缀 `m_`，那么在用 PCDC 命令保存模型时，这些函数会保存到文件中，在恢复保存的文件后，可以继续使用这些函数，例如：

```
# 定义前缀为 m_ 的函数
def m_mag(x,y):
    mag=math.sqrt(x*x+y*y)
    return mag
# 利用 PCDC 命令保存模型
pcdc model save 'test.sav'
```

下次重新运行 PCDC 程序并执行如下 PCDC 命令后，保存的函数可以直接使用，例如：

```
# 恢复保存的 PCDC 模型
pcdc model restore 'test.sav'
# 使用保存的函数(前缀为 m_)
m = m_mag(20.0,10.0)
print(m)
```

6.2 PCDC 命令

PCDC 命令可以在脚本文件中与 Python 混合使用，一个完整的 PCDC 命令行包括命令前缀“`pcdc`”、关键词(`keyword`)以及值(`value`)或者子关键词等。例如：

```
pcdc model new # 新的模型初始化
```

该命令包含前缀（“`pcdc`”，保留的关键词，不能作为变量或 Python 的其他变量或函数名的定义，该字符串仅用于表明该行开始 PCDC 命令），关键词 `model` 和子关键词 `new`（“`new`”是关键词“`model`”的次级关键词）。PCDC 命令可以插入到脚本文件任何地方，比如 Python 循环或 Python 函数中，例如：

```
#新的初始化模型
pcdc model new
#利用循环生成 9 条线段
for i in range(1,10):
```

```
pcdc geometry create polyline ([i],0) (0,[i]) as-layer ['line'+ str(i)]
```

上述示例中的 pcdc 命令生成如图 29 所示的 9 条线段。

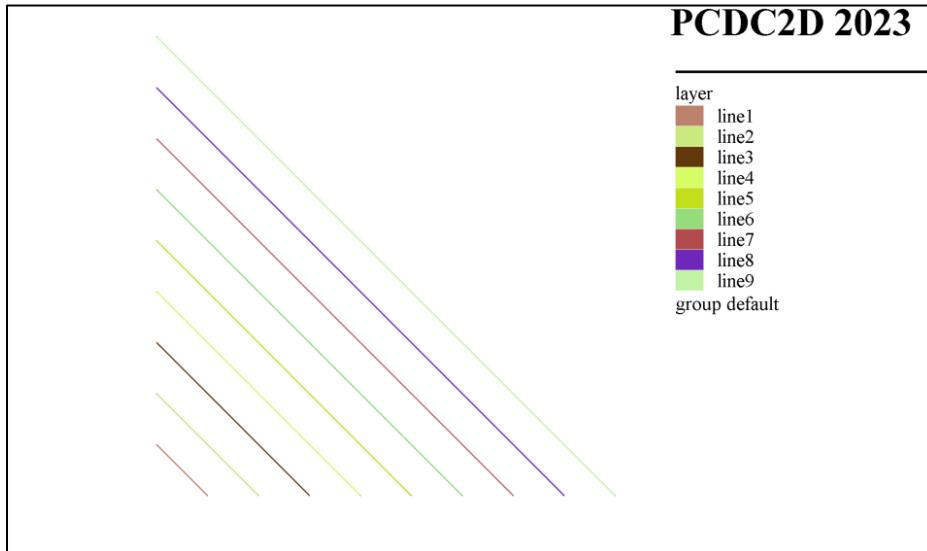


图 29 pcdc 命令生成几何线段

pcdc 命令 “pcdc geometry create polyline ([i],0) (0,[i]) as-layer ['line'+ str(i)]” 被插入到循环中。其中的主关键词为 “geometry”，表明是针对几何 (geometry) 的命令，“geometry”的子关键词为 “create”，表明是生成各种几何模型，“create”的子关键词 “polyline” 是指生成折线，后面接任意数量的矢量表示折线的对应多个节点坐标，PCDC2D 中坐标矢量由两个浮点值组成，在本示例命令中，由于引入了 Python 变量“i”，因此必须对该变量加 “[]”（注意：在 PCDC 命令中引用的 Python 变量或运算符必须将该变量和运算符包含在 “[]” 中，否则会报错）。“as-layer” 是 “create”的子关键词，表示生成的几何的层位名称（借用 CAD 术语），后面需要给出一个字符串定义生成的名称。同样的，由于给出的字符串包含 Python 字符串变量和 Python 运算符，必须加 “[]”，否则报错。该命令的分级定义如下：

- **geom{etry}**: 几何命令，子关键词为：
 - **cr{eate}**
 - **p{olyline}**
 - **v1,v2, ...** : 生成折线, v1, v2 是折线第一和第二个节点矢量 (v 表示矢量), ... 表示任意多节点矢量
 - **a{s}-l{ayer}**
 - **s:** 几何层位名称, s 是字符串

定义的关键词 “{ }” 外的字符是表示至少需要键入的字符，而 “{ }” 内的字符是可补充键入组成关键词（比如 geom, geome, geomet, geometr, geometry 均可表示关键词 geometry，主要用来简化命令输入），关键词后面的 v1、v2、... 等是需要提供的值，值的类型主要包括以下几种：

v: pcdc 矢量

i: 整型

f: 浮点值

s: 字符串

在命令说明文件中，如果浮点值后面有`<table>`，则表示该浮点值可以用 `table`（随时间变化的二维表）来表示，也就是该关键词后面可以是 `table "tablename"`，其中“`tablename`”是 `table` 的名称。因此 `table` 属于一种特殊的数据类型，可以用命令创建。

上面仅对 PCDC 命令做了简单的示例说明。在使用者计算机联网的情况下，请点击程序主菜单 **【help】->【Online Commands】**，可以查看 PCDC 所有命令的详细说明。

7.0 PCDC 混合有限元—离散元理论与实例

混合有限元-离散元是一种用于模拟固体力学问题的数值方法，它结合了有限元法和离散元法的优点，以解决具有复杂界面和裂纹行为的固体结构问题。在传统的有限元法中，固体结构被划分为小的单元，并在每个单元内建立一个适当的位移场和应力场。这种方法适用于整体性质均匀的材料，但当存在复杂的界面、断裂或大变形等情况时，传统有限元法的适用性就受到限制。离散元法是一种块体或粒子法，它将固体结构看作是由大量相互作用的离散元素组成的系统。每个离散元素都具有自己的运动规律和应力状态。离散元法适用于处理断裂、裂纹扩展和界面问题，但它在处理整体连续性问题时存在一些局限性。

混合有限元-离散元方法将有限元法和离散元法相结合，以克服它们各自的局限性。在该方法中，固体结构被划分为具有连续性的有限元单元，同时在有限元单元的界面上引入离散元素。有限元单元负责处理整体连续性和局部变形，而离散元素则负责处理断裂和界面行为。

混合有限元-离散元方法的主要思想是将有限元法和离散元法的优势相结合，从而能够模拟复杂的固体结构行为，包括裂纹扩展、断裂和界面行为。这种方法在研究岩土工程、地震工程和金属成形等领域中得到广泛应用，为工程师和科学家提供了一种强大的工具来解决实际工程问题。

混合有限元—离散元的数值计算模型与常规有限元计算模型类似，其计算模型首先根据几何模型进行网格剖分，划分为有限元单元（比如二维情况下的三角形单元或四边形单元，三维情况下的四面体单元或六面体单元等）和节点，如图 30 所示。与常规有限元不同之处在于：

- 其单元与相邻单元之间增加了一个节理单元，用来考虑单元之间的破裂。该节理单元的应力应变本构关系是粘聚区模型或者是摩尔—库仑模型（粘聚区模型的特例，用来模拟实际已经存在的裂纹）。需要注意的是，目前版本的 `pcdc` 程序假设模型的破裂沿剖分的网格的预设节理面，因此通常需要较密的网格来提高计算精度。
- 模型中可以通过接触力考虑单元非连续面之间的作用力，如图 30 所示的破裂面之间或试样和加载板之间的相互作用力。

混合有限元—离散元模型采用显式动力学迭代求解。每一步迭代计算中，通过单元应力、节理单元应力、非连续界面接触力等的求解得到各节点合力（包括通过边界条件施加的外荷载力等）后，然后利用节点动力学方程求解各节点位移，由于节点的位移导致单元应变变化，在下一步迭代中，通过重复求解应力及更新各节点力，再求解各节点位移。反复迭代求解，可以计算得出每一步的模型动力学状态。

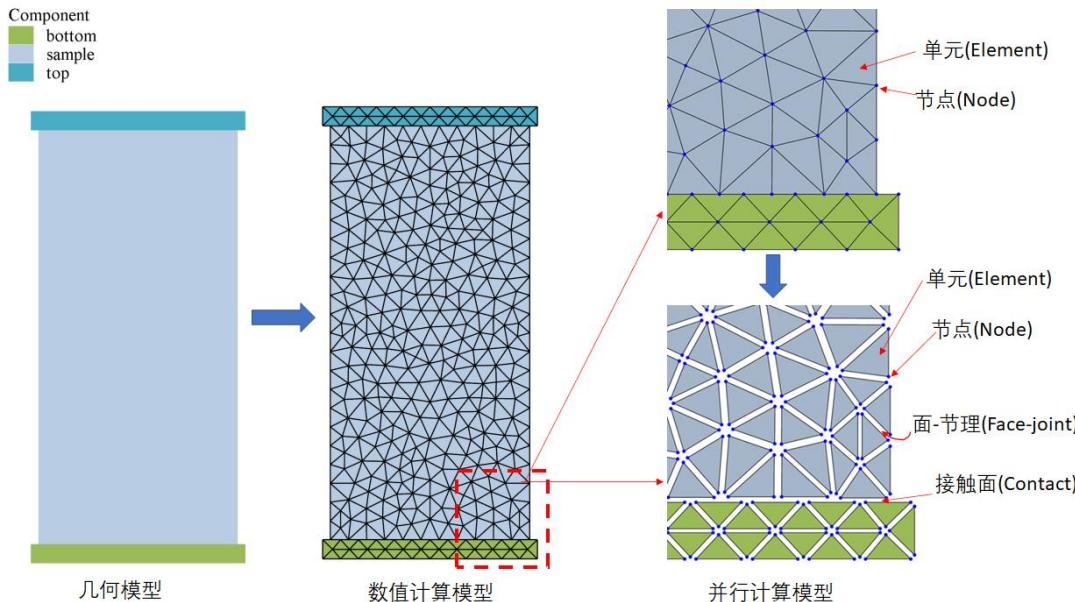


图 30 PCDC 有限元计算模型网格剖分

7.1 有限元显式动力学方程

有限元显式动力学方程是在有限元分析中用于模拟结构或体系在时间上的动态响应的方程。它是基于动量守恒定律和 Hooke 定律建立的。

有限元显式动力学方程可以表示为：

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}_{\text{ext}}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) - \mathbf{F}_{\text{other}}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad \text{i)}$$

其中，

M: 节点的质量矩阵，描述结构的质量特性。它通常是一个对角矩阵，其元素是节点的质量。

u: 节点位移向量

ū: 节点速度向量

ü: 节点加速度向量

C: 是阻尼 (damp) 矩阵，描述结构的能量耗散特性。阻尼通常是通过材料和结构的内部耗散来引入的，例如摩擦和粘性耗散。一维的质量-弹簧系统中的临界阻尼系数 $C = 2\sqrt{mk}$ ，其中 m 是质点质量， K 是弹簧刚度。

F_{int}: 模型内力向量，比如单元应力的节点等效力等

F_{ext}: 外载荷力向量，主要指在模型边界施加的载荷以及重量等

F_c: 接触力向量，比如单元不连续边界之间的接触力等

F_{other}: 模型其他力向量，比如流体压力等

假设 $\mathbf{F} = \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}_{\text{ext}}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}_c(\mathbf{u}) - \mathbf{F}_{\text{other}}(\mathbf{u})$ ，时间步长为 Δt ，那么

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{F} \quad \text{ii)}$$

$$\mathbf{M} \frac{\dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t} - \dot{\mathbf{u}}_t}{\Delta t} = \mathbf{F} \quad \text{iii)}$$

$$\dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t} = \frac{\mathbf{F}}{\mathbf{M}} \Delta t + \dot{\mathbf{u}}_t \quad \text{iv)}$$

其中， Δt 是时间步长； $\dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t}$ 和 $\dot{\mathbf{u}}_t$ 分别是时间 $t + \Delta t$ 时刻和时间 t 时刻的节点速度。根据 iv)求出速度后，可以按下列公式计算 $t + \Delta t$ 时刻的位移 $\mathbf{u}_{t+\Delta t}$ ，从而得到节点在该时间的位置。 \mathbf{u}_t 是时间 t 时刻的位移。

$$\mathbf{u}_{t+\Delta t} = \mathbf{u}_t + \dot{\mathbf{u}}_{t+\Delta t} \Delta t \quad \text{v)}$$

在有限元显式动力学分析中，时间被离散成一系列的步长，通过求解上述方程来获得每个时间步长上的结构响应。显式方法适用于模拟短暂的、高频的动态现象，因为它对时间步长有较高的稳定性要求。然而，它可能不适用于长时间的、低频的动态现象，因为会产生较大的数值误差。显式动力学方程的时间步长可以通过一些方法增大，比如节点质量缩放（mass scaling）等。

有限元显式动力学方程的求解通常使用数值积分方法，例如显式欧拉法、中点法或四阶龙格-库塔法等。这些方法通过离散化时间步长来近似连续时间下的结构响应。

显式动力学方程也可以通过一些方法来求解静力学问题，比如自动设置节点的阻力等

接下来的章节根据不同的物理学问题及其物理学方程来推导求解相应的方程和节点力。

7.2 有限元单元的力学模型

我们知道单元节点的移动会使单元变形，单元变形则会使单元内应力发生变化，从而使得内应力分解到节点的力发生改变。那么如何根据节点变化来求解内应力产生的节点力呢？首先，让我们用矢量分量 x_i 、 u_i 、 \dot{u}_i ($\dot{u}_i = (u_i^{t+dt} - u_i^t)/dt$) 来分别表示节点的位置、位移和速度，用张量 ε_{ij} 、 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ ($\dot{\varepsilon}_{ij} = (\varepsilon_{ij}^{t+dt} - \varepsilon_{ij}^t)/dt$)、 σ_{ij} 来分别表示单元内的应变、应变率和应力。在二维情况下， $i,j=2$ ，三维情况下， $i,j=3$ 。为了求内应力产生的节点力，需要解决三个问题，第一个是如何根据节点位置、位移或速度求解应变或应变率，第二个问题是根据应变和应变率求解应力，最后一个问题是如何根据应力求解节点力，下面分别推导公式来求解这三个问题。

7.2.1 单元应变计算

根据微分学定义的应变公式如下

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1)$$

假设单元内应变为常应变，那么可以利用下列面或体积内求平均值的积分公式

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{\Omega} \int_s \varepsilon_{ij} ds = \frac{1}{2\Omega} \int_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) ds \quad (2)$$

二维和三维情况下， Ω 分别等于三角形面积和四面体体积，积分则分别在三角形内和四面体内进行。根据高斯散度定理

$$\int_s \frac{\partial u_i}{\partial x_j} ds = \oint_c u_i \cdot n_j ds \quad (3)$$

其中, n_j 是单元边界上的外法向方向的单位矢量, 等式左边为单元内 S 上积分, 例如, 二维或三维情况下, 分别在三角形内或四面体内的积分, 等式右边为在构成单元的边界 C 上积分。

$$\oint_C u_i \cdot n_j ds = \sum_{f=0}^{N_{dim}} \bar{u}_i^{(f)} n_j^{(f)} s^{(f)} \quad (4)$$

其中, $N_{dim}=2$ (二维三角形单元) 或 $N_{dim}=3$ (三维四面体单元), $\bar{u}_i^{(f)}$ 、 $n_j^{(f)}$ 、 $s^{(f)}$ 分别为顶点序号为 f 对面的边界上的平均位移矢量、边界外法向方向矢量及边界特征尺寸。在本手册中, 二维边界为边, 其特征尺寸定义为边的长度, 三维体的边界是面, 其特征尺寸定义为面积。假设边界上的平均位移矢量根据边界上的所有顶点位移平均得到:

$$\bar{u}_j^{(f)} = \frac{1}{N_{dim}} \sum_{l=0, l \neq f}^{N_{dim}} u_j^l \quad (5)$$

其中, u_j^l 是序列为 l 的节点的位移向量, 那么,

$$\oint_C u_i \cdot n_j ds = \frac{1}{N_{dim}} \sum_{f=0}^{N_{dim}} \left(\sum_{l=0, l \neq f}^{N_{dim}} u_j^l \right) n_j^{(f)} s^{(f)} = \frac{1}{N_{dim}} \sum_{l=0}^{N_{dim}} u_j^l \sum_{f=0, f \neq l}^{N_{dim}} n_j^{(f)} s^{(f)} \quad (6)$$

由于,

$$\sum_{f=0}^{N_{dim}} n_j^{(f)} s^{(f)} = 0 \quad (7)$$

因此,

$$\sum_{f=0, f \neq l}^{N_{dim}} n_j^{(f)} s^{(f)} = -n_j^{(l)} s^{(l)} \quad (8)$$

所以,

$$\oint_C u_i \cdot n_j ds = -\frac{1}{N_{dim}} \sum_{l=0}^{N_{dim}} u_j^l n_j^{(l)} s^{(l)} \quad (9)$$

同理,

$$\oint_C u_j \cdot n_i ds = -\frac{1}{N_{dim}} \sum_{l=0}^{N_{dim}} u_j^l n_i^{(l)} s^{(l)} \quad (10)$$

根据(2)、(10)和(11), 得到单元内的应变值:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2\Omega} \int_s \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) ds = -\frac{1}{2\Omega N_{dim}} \sum_{l=0}^{N_{dim}} (u_j^l n_i^{(l)} + u_i^l n_j^{(l)}) s^{(l)} \quad (11)$$

相应的单元应变速率也可以根据时间步长 Δt 及时间 t 的应变和 $t + \Delta t$ 的应变求出。

7.2.2 单元应力及节点力计算

假设本次迭代的应力 $\sigma_{ij,t+\Delta t}$ 与上次应力 $\sigma_{ij,t}$ 、本次应变 $\varepsilon_{ij,t+\Delta t}$ 和应变率 $\dot{\varepsilon}_{ij,t+\Delta t}$ 、以及加载历史 \mathcal{H} 有关，那么单元的应力应变本构关系如下：

$$\sigma_{ij,t+\Delta t} = H(\sigma_{ij,t}, \varepsilon_{ij,t+\Delta t}, \dot{\varepsilon}_{ij,t+\Delta t}, \mathcal{H}) \quad (12)$$

给定不同材料的本构关系，可以求出本次迭代的应力。最后求解第三个问题：根据单元应力求解节点力。求解思路是先求出单元边界上的应力，然后平均到边界上的每个节点。

根据 Cauchy's 公式，

$$T_i^{(f)} = \sigma_{ij} n_i^{(f)} \quad (13)$$

其中， $T_i^{(f)}$ 是顶点 f 对面边界上的应力值，因此序号为 f 的顶点节点力可以用下列公式求出：

$$F_i^{(f)} = \frac{1}{N_{dim}} \sum_{l=0, l \neq f}^{N_{dim}} T_i^{(l)} s^{(l)} = -\frac{1}{N_{dim}} T_i^{(f)} s^{(f)} = -\frac{1}{N_{dim}} \sigma_{ij} n_i^{(f)} s^{(f)} \quad (14)$$

另外，考虑到单元的质量和重力加速度，单元的体积力表示为

$$f_v = \rho V g \quad (15)$$

其中， ρ 是单元的密度， g 是重力加速度， V 是单元体积。将单元体积力平均到每个节点上，则体积力引起的节点力为

$$F_v = \frac{1}{(N_{dim} + 1)} \rho V g \quad (16)$$

另外，在单元中需要考虑阻尼（damp）引起的粘性应力 $\sigma_{ij,v}$ （viscous stress）：

$$\sigma_{ij,v} = C \dot{\varepsilon}_{ij} \quad (17)$$

单元的临界阻尼系数 C 根据单自由度的质点-弹簧系统估算为

$$C = 2L\sqrt{\rho E} \quad (18)$$

其中 L 是单元的特征长度，可以由单元的边长的平均值得到，该公式将单元的质量 $m = \rho L$ 以及刚度 $k = EL$ 带入到一维的质量-弹簧系统中的临界阻尼系数公式 $C = 2\sqrt{mk}$ 中获得。通常在粘性应力公式中加入一个阻尼因子 D_f （damp factor）来考虑实际的阻尼耗散：

$$\sigma_{ij,v} = D_f C \dot{\varepsilon}_{ij} \quad (19)$$

其中， $D_f > 0$ 。求解准静力学问题时，通常可以设置 $D_f = 1.0$

7.2.3 单元的各向同性线弹性本构模型

根据 Generalized Hooke's law，应力与应变的线弹性本构关系由下列公式定义：

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (20)$$

其中， C_{ijkl} 是材料的四阶刚度张量。二维和三维情况下， i, j, k 和 l 的范围分别是 0~1 和 0~3。

对各向同性线弹性材料：

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (21)$$

其中, δ_{ij} 是 Kronecker delta 符号, 定义为:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (22)$$

$$\lambda = \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)} = K - \frac{2G}{3} \quad (23)$$

$$\mu = G = \frac{E}{2(1+v)} \quad (24)$$

其中, E、v、K分别是单元材料的弹性模量、泊松比和体积模量; μ 、G均代表材料的剪切模量; λ 是材料的 Lamé 系数。

在 PCDC 程序中, 各向同性线弹性本构模型由关键词 “mech{anical}-iso-{e} lastic” 定义, 其主要输入参数及对应的命令关键词如表 1 所示。其中, 输入参数也可以不用杨氏弹性模量和泊松比, 而用体积模量 (关键词: s{hear}) 和剪切模量 (关键词: b{ulk}) 作为单元的线弹性参数。摩擦角和罚函数是在接触面没有赋接触本构模型时, 用于单元接触面的接触力计算 (参见 7.2.9 内容), 省缺时摩擦角等于零, 罚参数为杨氏弹性模量的 10 倍。

表 1 各向同性线弹性本构模型(mech{anical}-iso-{e} lastic)输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
密度	ρ	den{sity}	浮点	kg/m^3
杨氏弹性模量	E	y{oung}	浮点	Pa
泊松比	ν	p{oisson}-r{atio}	浮点	-
剪切模量	G	s{hear}	浮点	Pa
体积模量	K	b{ulk}	浮点	Pa
阻尼因子	D_f	d{amp}-f{actor}	浮点	Pa
摩擦角		fri{ction}	浮点	°
罚参数		pen{alty}	浮点	Pa/m

7.2.4 摩尔-库伦 (Mohr-Coulomb) 弹塑性本构模型

弹塑性本构模型用主应力 σ_i 和主应变 ϵ_i 的关系表示 ($i = 0 \sim N_{dim}$, $\sigma_i > \sigma_{i+1}$)。求解应力主要分两步:

- 根据胡克定理 (Hooke's law) 按线弹性理论根据主应变增量求解主应力增量, 进而得到的试算主应力。主应力增量求解公式如下:

$$\Delta\sigma_i = \alpha\Delta\epsilon_i + \beta \sum_{j=0, j \neq i}^{N_{dim}} (\Delta\epsilon_j) \quad (25)$$

其中， $\Delta\sigma_i$ 和 $\Delta\epsilon_i$ 是主应力增量和主应变增量；

$$\alpha = K + \frac{4}{3}G \quad (26)$$

$$\beta = K - \frac{2}{3}G \quad (27)$$

因此，得到的试算主应力 $\sigma_{i,t+\Delta t}^*$ 为：

$$\sigma_{i,t+\Delta t}^* = \Delta\sigma_i + \sigma_{i,t} \quad (28)$$

其中， $\sigma_{i,t}$ 为上一次迭代得到的主应力。

- 2) 根据给定的塑性破坏准则，对进入塑性破坏区的 $\sigma_{i,t+\Delta t}^*$ 进行修正得到修正后的应力值 $\sigma_{i,t+\Delta t}$ 。摩尔-库伦本构模型的塑性破坏准则包括摩尔-库伦破坏准则以及张拉破坏准则，分别由公式(29)和公式(30)表示

$$f_s = -\sigma_1 + \sigma_3 N(\emptyset) - 2cN(\emptyset) = 0 \quad (29)$$

$$f_t = \sigma_3 - \sigma_t = 0 \quad (30)$$

$$N(\emptyset) = \frac{1 + \sin \emptyset}{1 - \sin \emptyset} \quad (31)$$

其中， σ_t 是拉应力强度， c 是粘结力， \emptyset 是摩擦角。

根据这两个准则划分的塑性破坏区位于主应力空间 f_s 和 f_t 之上，如图 31 所示。其中，剪切破坏区和张拉破坏区以中间线 BD 为界，AB 代表 $f_s = 0$ ，BC 代表 f_t 。

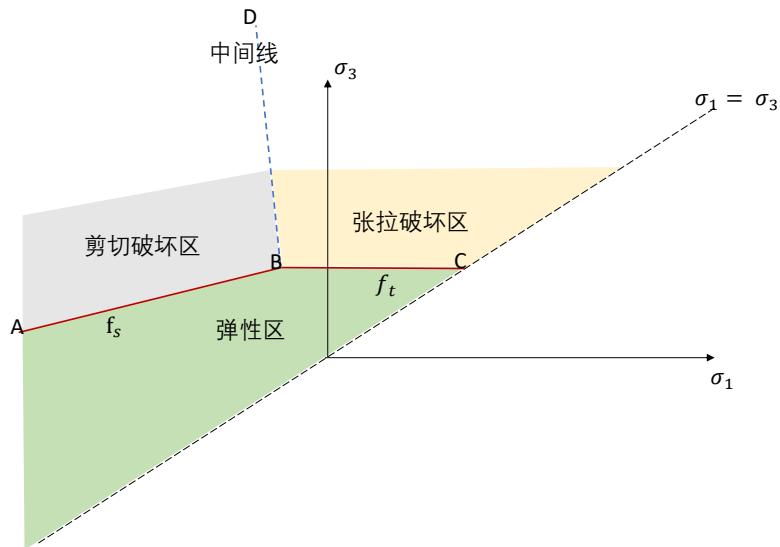


图 31 摩尔-库伦本构模型的塑性破坏区

进入塑性破坏区的单元分为两类：剪切破坏或者张拉破坏。如果 $\sigma_{i,t+\Delta t}^*$ 进入剪切破坏区，则被认为是剪切破坏，否则，如果进入拉裂破坏区，则被认为是张拉破坏。如果 $\sigma_{i,t+\Delta t}^*$ 在破坏区下方，则单元在弹性区， $\sigma_{i,t+\Delta t}^*$ 不需要修正。

进入剪切破坏区的应力根据非关联流动法则，由下列公式定义的塑性势函数进行修正：

$$g_s = -\sigma_1 + \sigma_3 N(\omega) \neq f_s \quad (32)$$

其中， ω 是膨胀角。

进入张拉破坏区的应力根据关联流动法则，由下列公式定义的塑性势函数进行修正：

$$g_t = \sigma_3 - \sigma_t = f_t \quad (33)$$

计算中，摩尔-库伦弹塑性本构模型“mech{anical}-m{ohr}-c{oulomb}”的输入参数见下表。其中，由于杨氏弹性模量和泊松比参数对和剪切模量与体积模量参数对等效，因此输入时只需输入其中一对参数。

表 2 摩尔-库伦弹塑性本构模型“mech{anical}-m{ohr}-c{oulomb}”的输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
密度	ρ	den{sity}	浮点	kg/m^3
杨氏弹性模量	E	y{oung}	浮点	Pa
泊松比	μ	p{oisson}-r{atio}	浮点	—
剪切模量	G	s{hear}	浮点	Pa
体积模量	K	b{ulk}	浮点	Pa
摩擦角	ϕ	fri{ction}	浮点	°
粘结力	c	coh{esion}	浮点	Pa
拉应力强度	σ_t	ten{sile}	浮点	Pa
剪胀角	ω	di{lation}	浮点	°
阻尼因子	D_f	d{amp}-f{actor}	浮点	Pa

7.2.5 经典 Burgers 蠕变模型

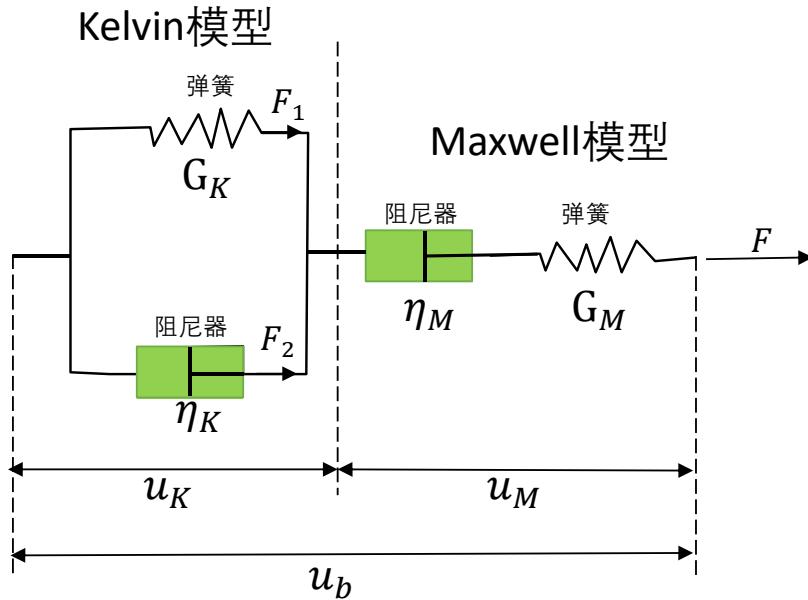


图 32 经典 Burgers 蠕变模型示意图

如图 32 所示，经典 Burgers 蠕变模型是 Kelvin 蠕变模型和 Maxwell 蠕变模型的串联。左边 Kelvin 蠕变模型由弹簧和阻尼器并联组成，其力学方程如下：

$$F = F_1 + F_2 \quad (34)$$

$$F_1 = G_K u_k \quad (35)$$

$$F_2 = \eta_K \dot{u}_K \quad (36)$$

其中， G_K 、 u_k 、 \dot{u}_K 和 η_K 分别是 Kelvin 模型弹簧的弹性常量、位移、速度和阻尼器的粘性常量，将公式(34)~(36)写成 Δt 时间段的位移有限变分形式：

$$u_{K,t+\Delta t} = u_{K,t} + (\bar{F}_t - G_K \bar{u}_{K,t}) \frac{\Delta t}{\eta_K} \quad (37)$$

其中， $u_{K,t+\Delta t}$ 和 $u_{K,t}$ 分别是 $t + \Delta t$ 时间和上次迭代计算时间 t 的 Kelvin 模型位移， \bar{F}_t 和 $\bar{u}_{K,t}$ 分别是在时段 Δt 的模型受力平均值和 Kelvin 模型的位移平均值：

$$\bar{F}_t = \frac{F_{t+\Delta t} + F_t}{2} \quad (38)$$

$$\bar{u}_{K,t} = \frac{u_{K,t+\Delta t} + u_{K,t}}{2} \quad (39)$$

右边 Maxwell 的力学方程为：

$$\dot{u}_M = \frac{\dot{F}}{G_M} + \frac{F}{\eta_M} \quad (40)$$

其中， G_M 、 η_M 和 \dot{u}_M 分别是 Maxwell 模型弹簧的弹性常量、阻尼器的粘性常量和 Maxwell 模型的速度。写成 Δt 时间段的位移有限变分形式为：

$$u_{M,t+\Delta t} = u_{M,t} + \frac{F_{t+\Delta t} - F_t}{G_M} + \frac{\bar{F}_t \Delta t}{\eta_M} \quad (41)$$

总位移有限变分为：

$$u_{b,t+\Delta t} - u_{b,t} = (u_{K,t+\Delta t} - u_{K,t}) + (u_{M,t+\Delta t} - u_{M,t}) \quad (42)$$

上述公式的未知量是 $u_{K,t+\Delta t}$ 、 $u_{M,t+\Delta t}$ 和 $F_{t+\Delta t}$ ，已知量为 $u_{K,t}$ 和 F_t 。Burgers 模型的力学响应与历史的状态量 $u_{K,t+\Delta t}$ 有关，从公式(37)可以推出：

$$u_{K,t+\Delta t} = \frac{1}{A_b} \left(B_b u_{K,t} + \frac{(F_{t+\Delta t} + F_t) \Delta t}{2\eta_K} \right) \quad (43)$$

其中，

$$A_b = 1 + \frac{G_K \Delta t}{2\eta_K} \quad (44)$$

$$B_b = 1 - \frac{G_K \Delta t}{2\eta_K} \quad (45)$$

根据公式(41)、(42)和(43)得到：

$$F_{t+\Delta t} = \frac{1}{X_b} \left(u_{b,t+\Delta t} - u_{b,t} + Y_b F_t - \left(\frac{B_b}{A_b} - 1 \right) u_{K,t} \right) \quad (46)$$

其中，

$$X_b = \frac{1}{K_M} + \frac{\Delta t}{2\eta_M} + \frac{\Delta t}{2A_b\eta_K} \quad (47)$$

$$Y_b = \frac{1}{K_M} - \frac{\Delta t}{2\eta_M} - \frac{\Delta t}{2A_b\eta_K} \quad (48)$$

计算中，经典 Burgers 蠕变模型“mech{anical}-bur{gers}”的输入参数见表 3。该模型只考虑偏应力产生的蠕变。其中，由于杨氏弹性模量和泊松比参数对和 Kelvin 剪切模量与体积模量参数对等效，因此输入时只需输入其中一对参数。Kelvin 的应变输入是在初始化应力时，为了与输入的应力相容，需要根据初始化的应力值设置相应的应变值。(3D)表示只在 PCDC3D 需要的参数。

表 3 Burgers 蠕变模型“mech{anical}-bur{gers}”的输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
密度	ρ	den{sity}	浮点	kg/m^3
杨氏弹性模量	E	y{oung}	浮点	Pa
泊松比	μ	p{oisson}-r{atio}	浮点	—
kelvin 剪切模量	G_K	k{elvin}-s{hear}	浮点	Pa
体积模量	K	b{ulk}	浮点	Pa
Kelvin 粘性系数	η_K	k{elvin}- v{iscosity}	浮点	$Pa.s$
Maxwell 剪切模量	G_M	m{axwell}-s{hear}	浮点	Pa

Maxwell 粘性系数	η_M	$m\{axwell\}-v\{iscosity\}$	浮点	$Pa.s$
Kelvin X 方向的应变		$K\{elvin\}-s\{train\}-xx$	浮点	—
Kelvin Y 方向的应变		$K\{elvin\}-s\{train\}-yy$	浮点	—
Kelvin XY 方向的剪应变		$K\{elvin\}-s\{train\}-xy$	浮点	—
Kelvin Z 方向的应变(3D)		$K\{elvin\}-s\{train\}-zz$	浮点	—
Kelvin XZ 方向的剪应变(3D)		$K\{elvin\}-s\{train\}-xz$	浮点	—
Kelvin YZ 方向的剪应变(3D)		$K\{elvin\}-s\{train\}-yz$	浮点	—
阻尼因子	D_f	$d\{amp\}-f\{actor\}$	浮点	Pa

7.2.6 边界条件

固体力学的边界条件主要包括力、速度、加速度以及应力等。其中，力、位移和加速度边界条件均施加于单元节点（node）上，而应力边界条件则施加于单元面（element-face）上。

表 4 是速度及速度边界条件输入参数表。在表中，(3D)表示该参数在 PCDC3D 中输入，PCDC2D 没有该项参数的输入；浮点

表 5 是施加于节点的力的边界条件输入参数表。而表 6 是施加于单元面的应力边界条件，其中，定义的面法向方向的应力在计算中自动随面的方向的变化而自动改变方向，始终保持垂直于该单元面。

另外，还有一种特殊的施加于单元节点的约束边界条件。在表 7 中，节点的运动方向约束类型（t{ype}）需要输入两个值：整型和矢量。整型数值（2D: 0~2, 3D: 0~3）表示约束类型：0 表示无约束；1 表示点约束，即该节点固定不动；2 表示沿线约束，即该节点只能沿输入的矢量方向移动；3 表示沿面的约束，即该节点只能在由该点坐标和输入的矢量作为法向方向的平面上移动。其中，约束类型 3 只能在 PCDC3D 中输入。

表 4 速度及加速度边界条件 (mech{anical}-vel{ocity}-b{oundary}-c{ondition}) 参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
沿 X 方向的速度	$v\{elocity\}-x$	浮点 <table></table>	m/s
沿 Y 方向的速度	$v\{elocity\}-y$	浮点 <table></table>	m/s
沿 Z 方向的速度(3D)	$v\{elocity\}-z$	浮点 <table></table>	m/s
沿 X 方向的加速度	$a\{cceleration\}-x$	浮点 <table></table>	m/s^2

沿 Y 方向的加速度	a{cceleration}-y	浮点<table>	m/s^2
沿 Z 方向的加速度(3D)	a{cceleration}-z	浮点<table>	m/s^2

表 5 力的边界条件 (mech{anical}-f{orce}-b{oundary}-c{ondition}) 参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
沿 X 方向的力	f{orce}-x	浮点<table>	N
沿 Y 方向的力	f{orce}-y	浮点<table>	N
沿 Z 方向的力(3D)	f{orce}-z	浮点<table>	N

表 6 应力边界条件 (mech{anical}-s{tress}-b{oundary}-c{ondition}) 参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
沿 X 方向的应力	s{tress}-x{x}	浮点<table>	Pa
沿 Y 方向的应力	s{tress}-y{y}	浮点<table>	Pa
沿 Z 方向的应力(3D)	s{tress}-z{z}	浮点<table>	Pa
面法向方向的应力	s{tress}-n{ormal}	浮点<table>	Pa

表 7 约束边界条件 (mech{anical}-m{ove}-b{oundary}-c{onstraint}) 参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
约束类型	t{ype}	整型, 矢量	

7.2.7 算例一：验证各向同性线弹性本构模型

给定如图 33 所示中心有孔的圆盘，圆孔的半径为 a ，圆的外半径上远大于中心圆孔半径，在远场 X 和 Y 方向应力分别为 P_1 和 P_2 作用下的圆盘内任意点 (r, θ) 的切向应力、径向应力以及切向剪应力的解析解如下 (Jaeger et al. 2009)：

$$\sigma_\theta = \frac{P_1 + P_2}{2} \left(1 + \frac{a^2}{r^2} \right) - \frac{P_1 - P_2}{2} \left(1 + \frac{3a^4}{r^4} \right) \cos 2\theta \quad (49)$$

$$\sigma_r = \frac{P_1 + P_2}{2} \left(1 - \frac{a^2}{r^2} \right) + \frac{P_1 - P_2}{2} \left(1 - \frac{4a^2}{r^2} + \frac{3a^4}{r^4} \right) \cos 2\theta \quad (50)$$

$$\tau_{r\theta} = -\frac{P_1 - P_2}{2} \left(1 + \frac{2a^2}{r^2} - \frac{3a^4}{r^4} \right) \sin 2\theta \quad (51)$$

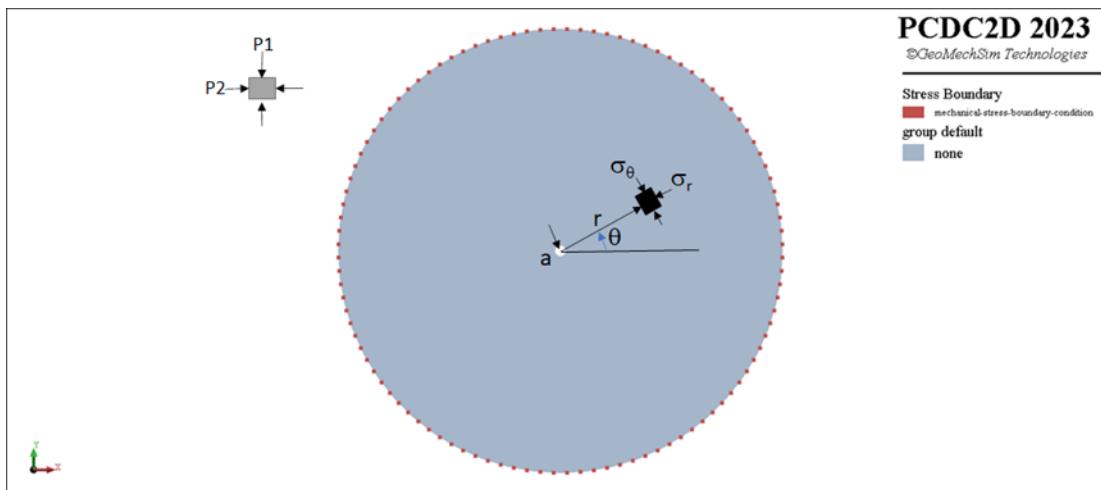


图 33 远场应力作用下的中心有孔洞的圆盘模型

PCDC 的圆盘材料的弹性力学参数如下：

密度(density): 2500 kg/m^3

杨氏弹性模量(Young's modulus): 50 GPa

泊松比(Poisson ratio): 0.25

阻尼因子(Damp factor): 1.0

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\Mechanical\Mech-iso-elastic”，找到并打开工程文件“mech-iso-elastic_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“iso-elastic-static_2d.sc”，得到如图 34 所示的计算结果，图中显示了水平向应力云图以及沿圆盘中心水平方向的切向应力和径向应力的解析解与数值计算结果的曲线。对比结果显示数值计算结果与解析解吻合良好。在该脚本的运行中，用的是静力计算，静力计算中，阻尼因子不起作用。在没有破裂和接触力计算的情况下，如果是静力计算并且关闭自动调整迭代时间步长开关，程序的默认时间步长是 1 个时间单位。下面的几个命令行用来打开关闭计算选项：

```
# 关闭自动调整迭代时间步长，默认情况下是关闭的
pcdc model time-step auto off

# 关闭动力学计算选项，做静力计算
pcdc model option dynamic off

# 关闭碰撞检测和接触力计算，可以加快计算速度
pcdc model option collision off
```

该算例也可以用通过设置材料阻尼因子，利用动力学计算来模拟准静力平衡状态。在该脚本中将变量 m_dyn 设置为 True (m_dyn=True)，重新运行脚本文件，则得到和静力学计算一样的结果。不同之处主要是：动力学计算中，可以通过设置材料的阻尼因子考虑能量耗散而达到静力平衡，但达到准静力平衡需要更多的迭代步数和较小的时间步长；而静力学计算则不需要设置阻尼因子，达到静力平衡需要更少的迭代步数。

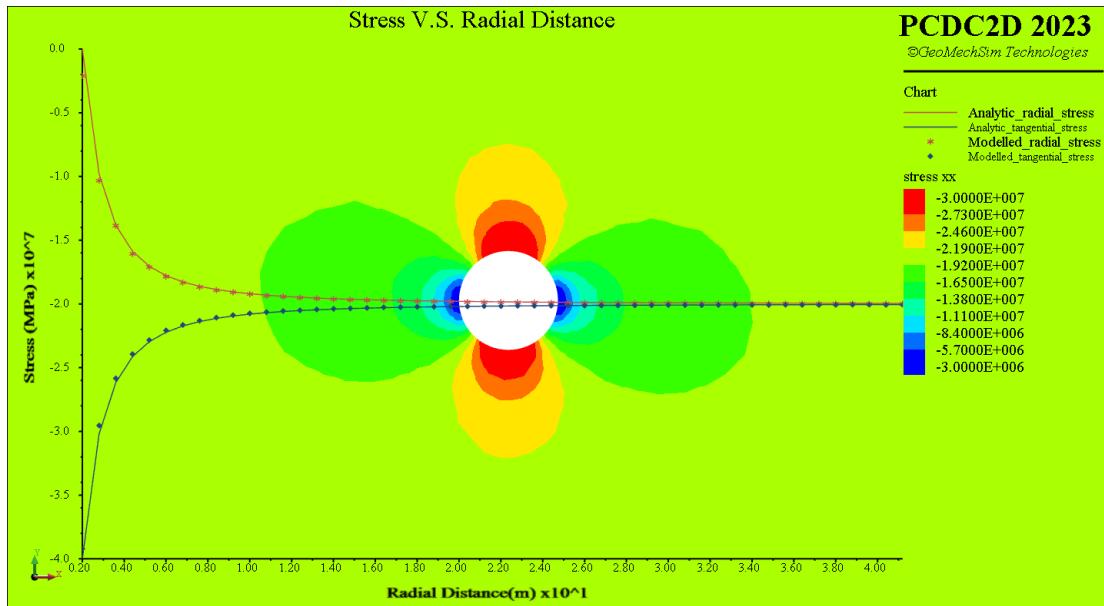


图 34 远场应力作用下的中心有孔洞的圆盘的应力云图以及理论解与数值模拟结果对比

7.2.8 算例二：土质边坡工程分步开挖模拟

本算例演示土质边坡工程分步开挖过程的模拟。土质边坡采用摩尔-库伦弹塑性本构模型，每步开挖均采用静力学计算。图 35 是该边坡计算模型，左右两边施加了水平速度边界条件，速度等于零，表示在水平方向固定边界，模型底部施加垂直方向速度为零的边界条件，表示底部在垂直方向固定。开挖步及开挖范围等均用命令的组（group）和类（set）进行定义。如图 36 所示，模型剖分为四边形单元，使计算的精度更高。

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\Mechanical\SequentialExcavation”，找到并打开工程文件“SequentialExcavation_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“SequentialExcavation_2d.sc”，输出的计算结果如图 37、图 38、图 39 和图 40 所示，分别为开挖前的自重应力场、每步开挖的应力变化云图、开挖完成后边坡的塑性区以及位移场云图等。在脚本文件中，需要注意下面几个关键命令：

- 模拟中，静力学计算需要关闭动力学开关：
pcdc model option dynamic off
- 开挖前计算完自重应力场后，一般需要将节点的位移和速度重置为零、以及单元的弹塑性状态重置为弹性：
pcdc node reset velocity
pcdc node reset displacement
pcdc element reset state
- 将单元的本构模型设置为“null”，即表示该单元是开挖单元，不再参与计算和显示：
pcdc element c-model null range group 'excav_1' set 'domain'

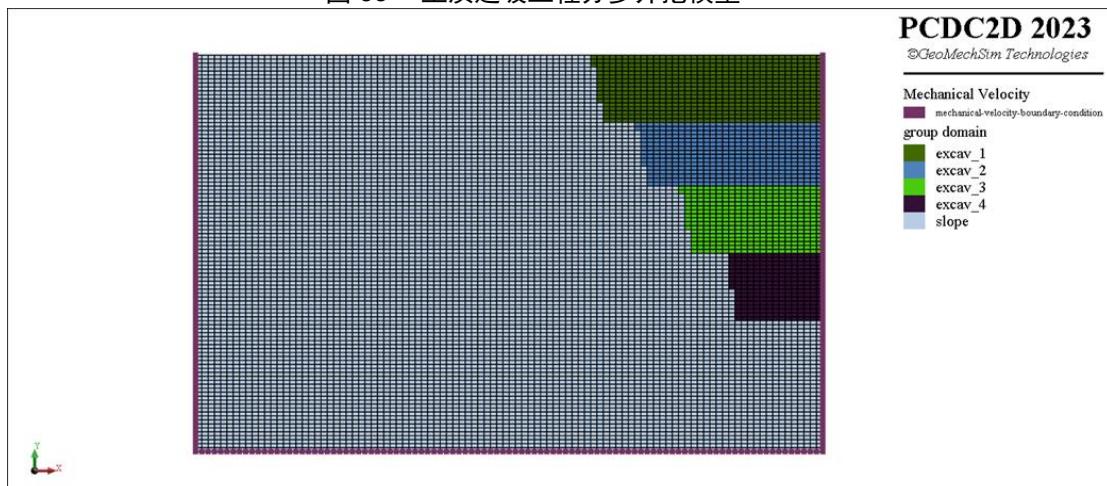
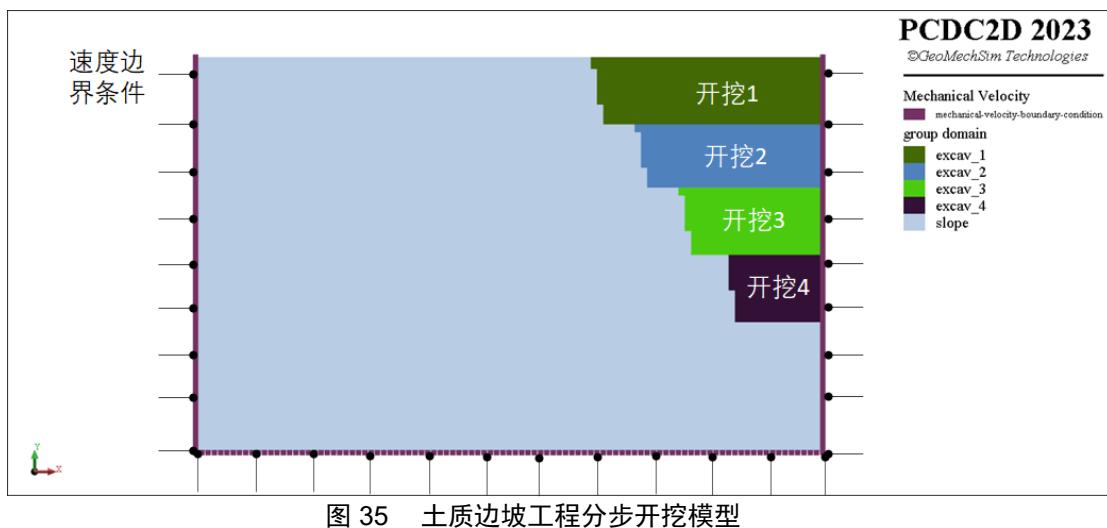


图 36 模型剖分为四边形单元

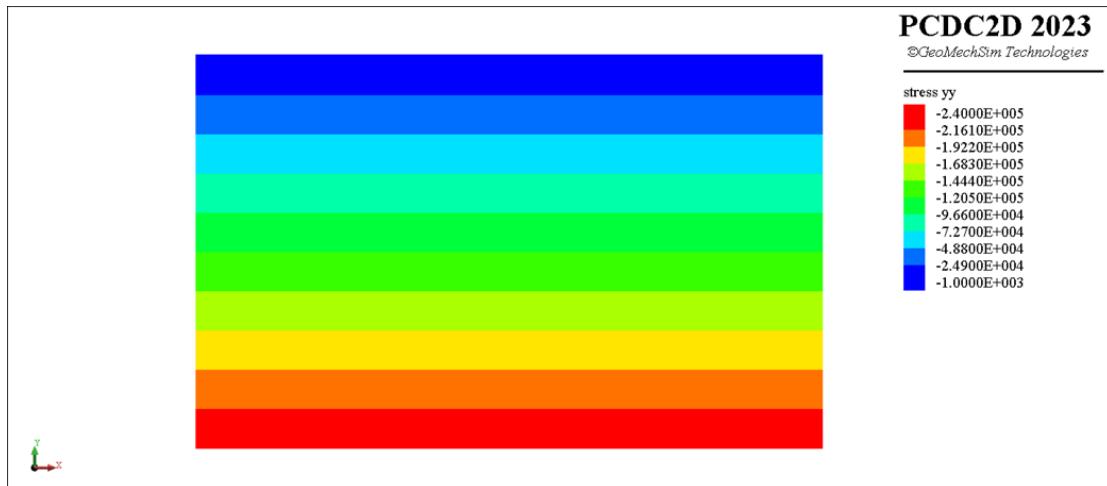


图 37 开挖前的初始自重应力场

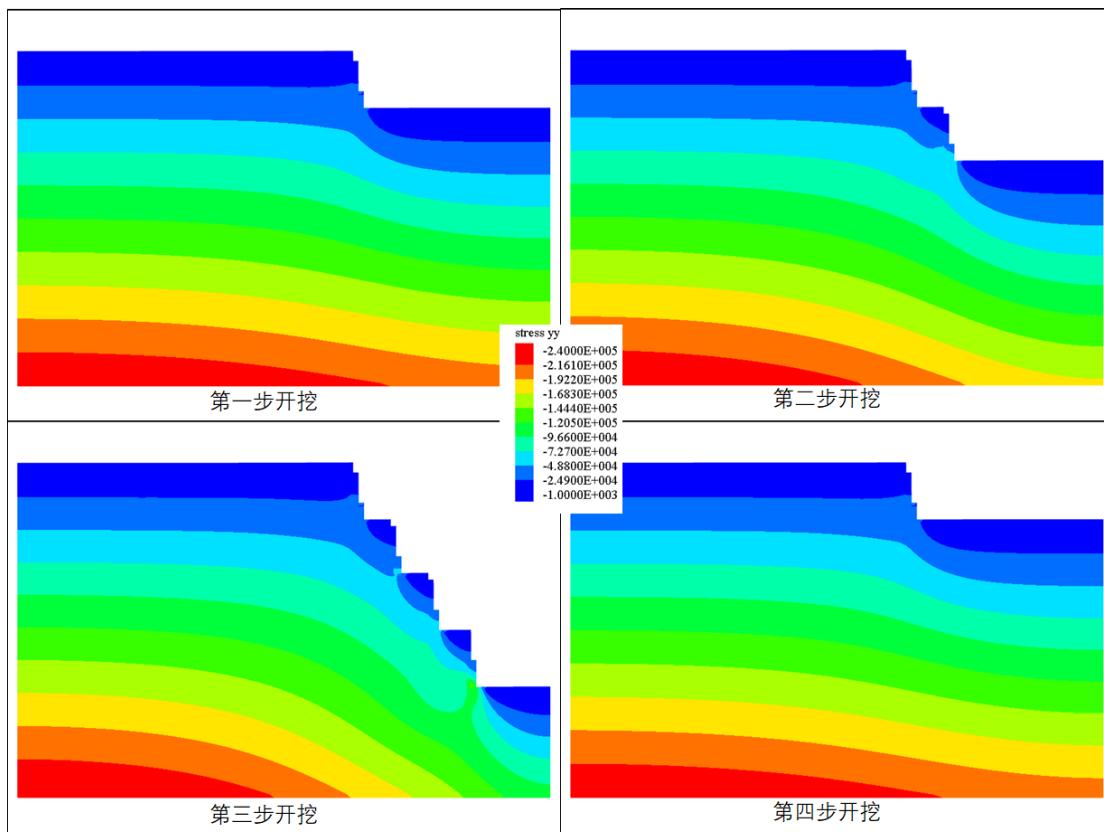


图 38 每一步开挖的垂直应力云图

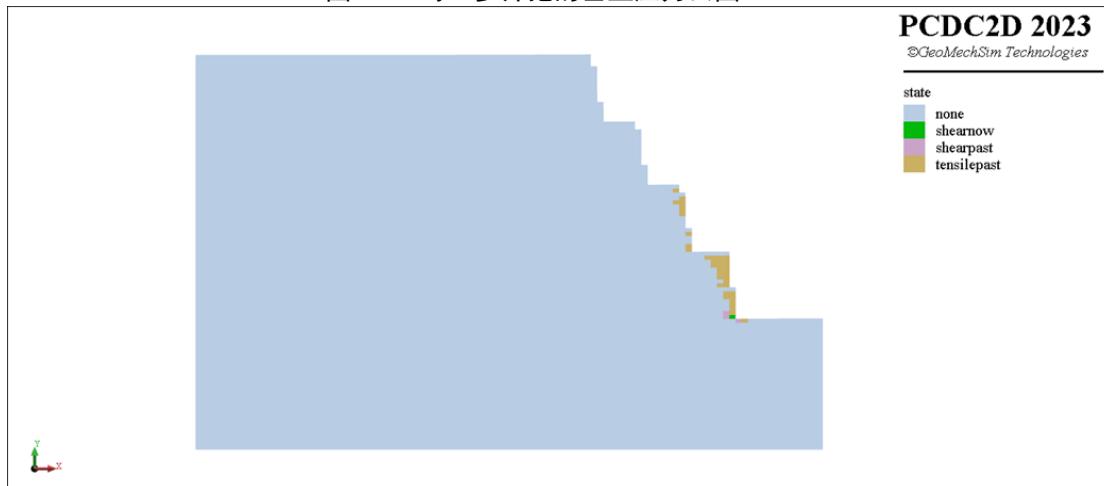


图 39 边坡开挖产生的塑性区（以张拉破坏为主）

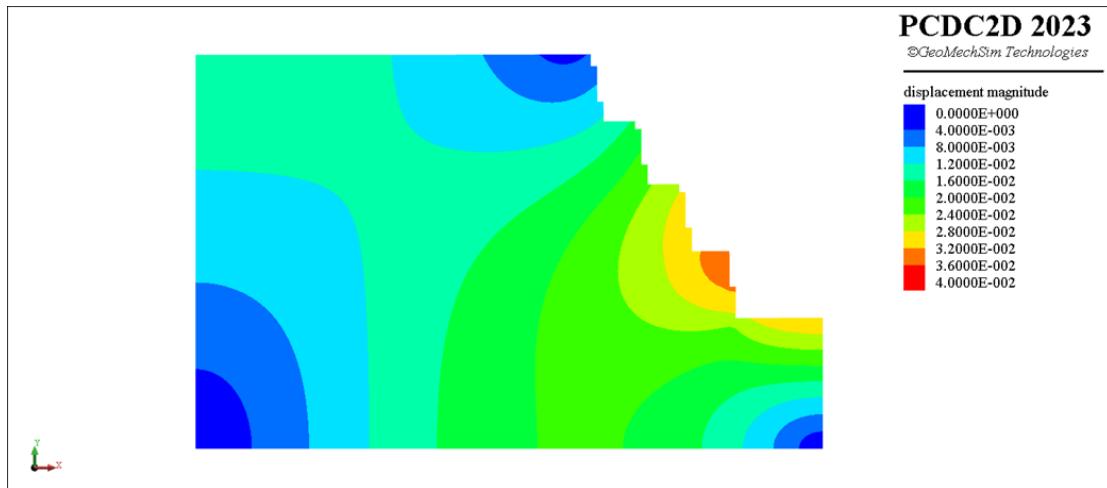


图 40 开挖后边坡的位移云图

7.2.9 算例三：蠕变模型

7.3 接触力计算

非连续体之间的接触产生相互之间的排斥力即为接触力。在 PCDC2D 中主要考虑三角形单元与三角形单元之间的接触力计算，而在 PCDC3D 中主要考虑四面体单元与四面体单元之间的接触力计算。基本离散单元之间的接触力计算方法比较多，PCDC 采用 Munjiza 提出的势函数法求解接触力（Munjiza, 2004），下面以二维为例简述该算法。

7.3.1 法向接触力计算

如图 41 所示，定义线弹性目标体 B_c 和靶体 B_t ， B_t 和 B_c 重合的区域为 $S = B_t \cap B_c$ ，该区域的边界为 $\Gamma_{B_t+B_c}$ 。目标体 B_c 嵌入到靶体 B_t 的微小面积 dA 处所产生的接触力为：

$$df_{c1} = -P_{n_con} \mathbf{grad}\varphi_t(p_t) dA \quad (52)$$

其中， $\varphi_t(p_t)$ 是重叠区域靶体内一点 p_t 在靶体 B_t 内的势函数， \mathbf{grad} 是梯度， P_{n_con} 是接触面的法向罚参数。同理，靶体 B_t 嵌入到目标体 B_c 的微小面积 dA 处所产生的接触力为：

$$df_{t1} = -P_{n_con} \mathbf{grad}\varphi_c(p_c) dA \quad (53)$$

其中， $\varphi_c(p_c)$ 是重叠区域目标体内一点 p_c 在靶体 B_c 内的势函数。由于 df_{t1} 是目标体势能提供对靶体的作用力，其反作用力就是相同大小，方向相反的靶体对目标体的作用力：

$$df_{c1} = P_{n_con} \mathbf{grad}\varphi_c(p_c) dA \quad (54)$$

因此，重叠区域 S 内微小面积 dA 处靶体对目标体的总接触力为：

$$df_c = df_{c1} + df_{t1} = P_{n_con} \{\mathbf{grad}\varphi_c(p_c) - \mathbf{grad}\varphi_t(p_t)\} dA \quad (55)$$

在 S 内积分得到总接触力为：

$$f_c = \int_S P_{n_con} \{\mathbf{grad}\varphi_c(p_c) - \mathbf{grad}\varphi_t(p_t)\} dA \quad (56)$$

根据格林公式，将面积分转化为面积边界的线积分：

$$f_c = P_{n_con} \oint_{\Gamma_{B_t+B_c}} (\varphi_c - \varphi_t) n_\Gamma d\Gamma \quad (57)$$

其中, n_Γ 是边界上的外法向向量。

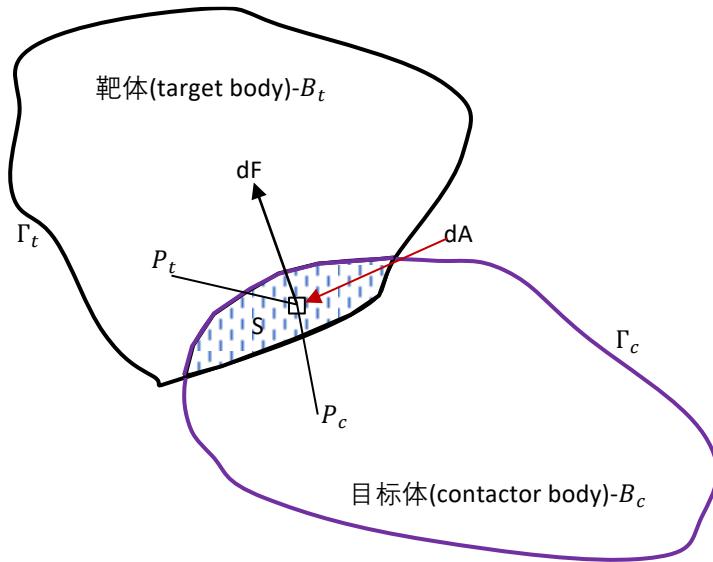


图 41 目标体与靶体接触重叠处的势的接触力

基于势的接触力对势函数的唯一要求是：势函数 φ 在离散的单元体的边界上应为常量，这样才能保证目标体进入靶体之后再离开靶体时接触力做的总功为零，也就是无能量变化而符合能量守恒定理。因此，可以定义满足该要求的各种势函数来进行接触力计算。**Munjiza** 定义的二维三角形单元内的势函数为：

$$\varphi(p) = P_{n_con} \min(3A_1/A, 3A_2/A, 3A_3/A) \quad (58)$$

$A_i (i = 1, 2, 3)$ 为三角形内任一点 p 与三角形三个边分别构成的子三角形面积, A 是三角形面积。因此, 三角形中心点的势函数等于 P_{n_con} , 而三角形边上的势函数等于常量 0, 满足势的接触力对势函数的要求。

根据定义的势函数以及两个接触单元的几何形状和位置 (如图 42 所示, 单元 A 与单元 B 接触), 按照如下步骤计算接触力:

首先对单元 B 进入单元 A 而受到 A 的势的接触力进行计算:

① 计算边 46 与单元 A 中心点 o 与三个节点的连线(o1、o2 和 o3)以及三个边线(12、23 和 31)的交点, 并计算交点处的势函数值 ($p1, p2, p3=0$);

② 求解势函数值构成的面积, 即为单元 A 对边 46 的接触力, 并求解该接触力的作用点位置, 将该接触力等效分解到节点 4 和 6 上, 同时将该接触力的反作用力分解到单元 A 的三个节点上;

③ 按同样的方法对单元其他两条边进行接触力计算;

然后对单元 A 进入单元 B 而受到 B 的势的接触力按照上述方法进行计算。这样就可以得到单元 A 与单元 B 之间的接触力。

需要注意的是, 当法向罚参数 P_{n_con} 的值趋于无穷大时, 单元 A 与单元 B 接近不可重叠。然而, 在实践中, 太大的罚参数会导致时间积分问题, 显示动力学方程的时间步长需要更小才能保证求解的稳

定性。尽管模型的整体刚度会由于允许一定量的单元间的重叠而被人为地减少，但如果罚参数足够大，则对整体模型刚度的相对影响可以忽略不计。建议在数值计算中，取罚参数的值为单元的弹性模量的 10 到 100 倍。

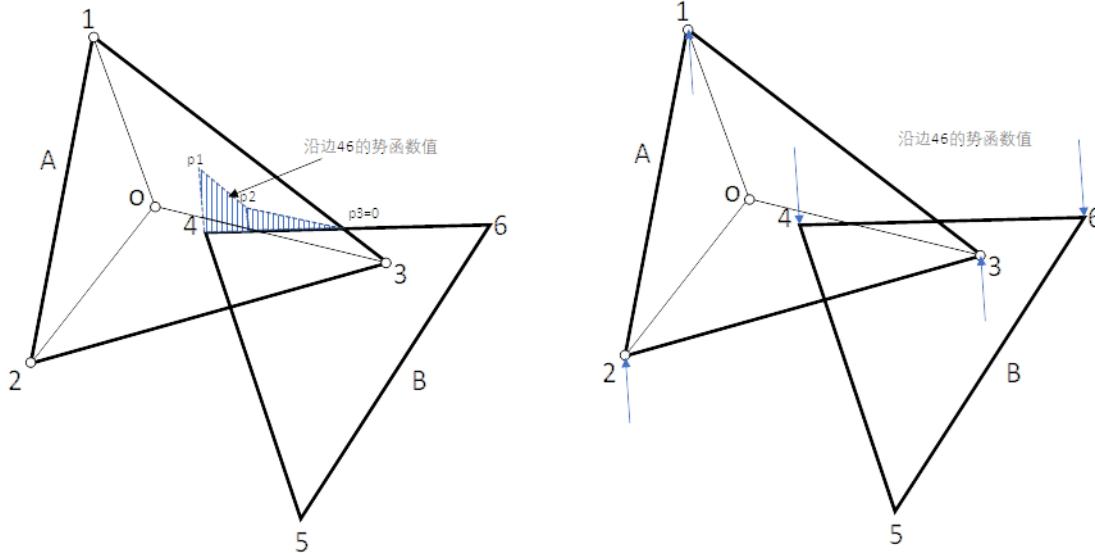


图 42 单元法向接触力计算示意图（左边：沿边 46 的接触势函数值分布；右边：边 46 上计算得到的接触力在目标体和靶体节点上的分解）

7.3.2 切向接触力计算

上述方法计算的是沿三角形边的法向接触力，沿切向方向的摩擦力则根据接触面的摩擦系数、法向接触力以及定义的剪切罚参数来进行计算 (Tatone and Grasselli, 2015)：

$$\vec{\tau} = \frac{\vec{V}_r}{|\vec{V}_r|} \text{Minimum}(P_{t,con} h |\delta_s|, \tan(\emptyset) \sigma_{n,con}) \quad (59)$$

其中， $P_{t,con}$ 是接触面的切向罚参数， h 是接触面的长度（三维情况下等于接触面的面积的平方根）， \vec{V}_r 是接触面相对速度在接触面上的投影向量， \emptyset 是节理单元的摩擦角， $\sigma_{n,con}$ 是接触面的法向接触力，由上述法向接触力除以接触面积计算得到。 δ_s 是接触面从接触开始相对剪切滑动的累计距离，根据时间步长以及相对剪切滑动速度计算。如果 $P_{t,con} h |\delta_s| > \tan(\emptyset) \sigma_{n,con}$ ，那么 δ_s 重置为

$$\delta_s = \frac{\tan(\emptyset) \sigma_{n,con}}{P_{t,con} h} \quad (60)$$

$P_{t,con}$ 的引入主要是考虑在接触面启动摩擦滑移前在剪切方向的作用力。 $P_{n,con}$ 一样， $P_{t,con}$ 常取值在有限单元的 10 到 100 倍之间。

另外，如果考虑接触过程中的能量耗散，下列公式用来修正实际的法向接触应力 (An and Tannant, 2007)：

$$\sigma_{n,con} = \begin{cases} \text{Minimum}(\sigma_{n,con_try}, T) & \text{if } o_n \text{ 增加 (加载)} \\ T \left(\frac{o_n}{o_n^{max}} \right)^b & \text{if } o_n \text{ 减小 (卸载)} \end{cases} \quad (61)$$

其中, $\sigma_{n_con_try}$ 是修正之前得到的接触面法向应力, o_n 是接触重叠深度, o_n^{max} 是接触重叠过程中达到的最大深度。 T 和**b**分别为阻尼过渡力及阻尼指数, 如下图所示。

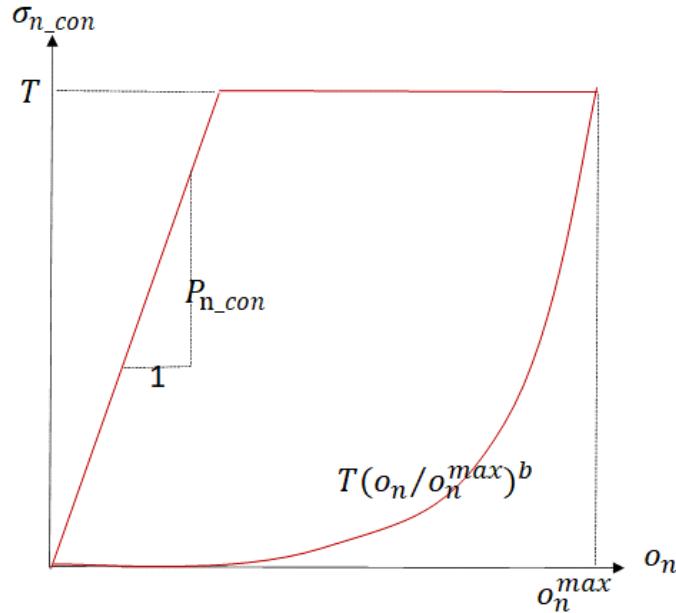


图 43 接触阻尼的幂函数 (modified after An and Tannant ,2007)

7.3.3 本构模型输入参数

接触本构模型“c{ontact}-m{ohr}-c{oulomb}”的输入参数见表 8:

表 8 接触本构模型 “c{ontact}-m{ohr}-c{oulomb}” 的输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
摩擦角	ϕ	F{riction}	浮点	°
法向罚参数	P_{n_con}	p{enalty}-n{ormal}	浮点	Pa/m
剪切罚参数	P_{t_con}	p{enalty}-s{hear}	浮点	Pa/m
阻尼过度力	T	d{amping}-t	浮点	Pa
阻尼指数	b	d{amping}-b	浮点	-

7.3.4 算例一：滑块运动模拟

该算例用来模拟给定初速度的滑块在有摩擦力的接触支座上的滑行距离。数值模型如图 44 所示, 滑块和固定的支撑基座均被剖分为三角形单元。给定初速度的滑块的滑行距离的理论解为:

$$d = \frac{v_0^2}{2g \tan \phi} \quad (62)$$

其中, v_0 是给定的水平初速度, g 是重力加速度, ϕ 是滑块和支撑底座之间接触面的摩擦角。

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\Mechanical\BlockSliding\”，找到并打开工程文件“Block_sliding_vel_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“Block_sliding_vel_2d.sc”，得到如图 45 所示的计算结果，图表中显示了滑块在不同初速度下的滑行距离的理论解（曲线）与数值计算结果（点）。结果显示数值计算结果与解析解吻合良好。

由于是动力和接触计算，因此需要打开动力和接触碰撞计算：

#打开动力计算（“#”表示注释行）

pcdc model option dynamic on

#打开接触碰撞计算

pcdc model option collision on

接触面模型用下列命令行赋给所有单元-面：

contact model

pcdc element-face c-model contact-m-c property pen-shear [m_c_pen_shear] pen-normal [m_c_pen_norm] friction [m_c_fric]

其中关键词“contact-m-c”表示接触面模型，关键词“property”后面是给该模型参数赋值，包括法向罚参数、切向罚参数以及摩擦角等参数，分别由变量 m_c_pen_shear、m_c_pen_norm 和 m_c_fric 定义，因此这些变量需要用“[]”。

另外，脚本中还定义了 python 函数“m_GetModelledDisp”和“m_GetAnalyticDisp”来分别计算模拟和理论滑行距离。计算结果作为数据序列放入到数据库并在图表中绘制。



图 44 模拟给定初速度的滑块的滑行距离的计算模型

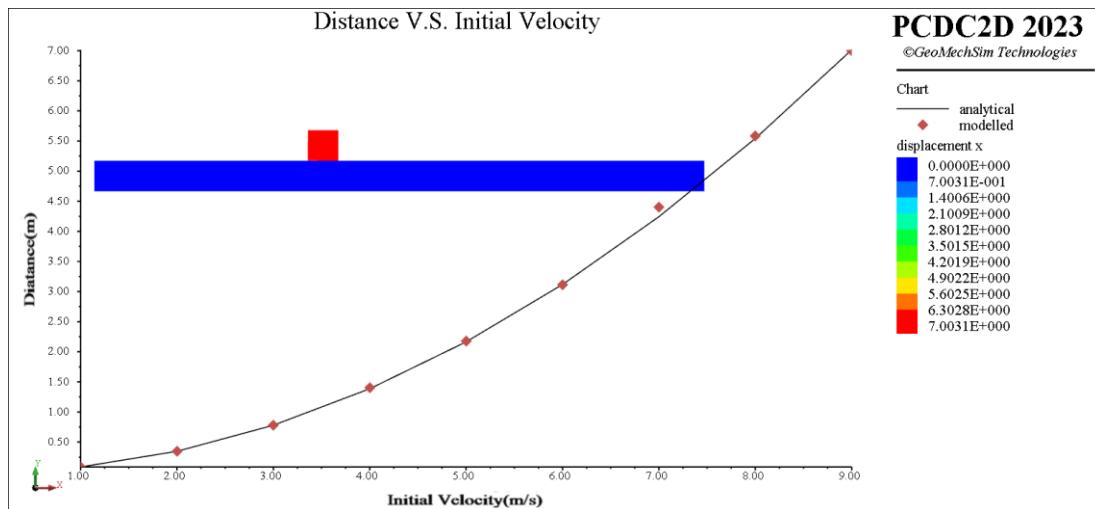


图 45 滑块滑行距离的模拟计算结果与解析解对比

7.4 节理的内粘聚区模型 (Intrinsic Cohesive Zone Model)

内粘聚区模型 (CZM) 是断裂力学中的一种模型，其中断裂形成被认为是一种渐进现象。如图 46 所示，裂纹涉及的表面分离发生在扩展的裂纹尖端或内聚区域，并通过粘合抵抗牵引力。通过使用 CZM，可以预测多种材料的裂纹萌生和扩展，并使断裂过程区域的详细描述成为可能 (Alfano, M. et al. 2009)。CZM 假设断裂过程区可以通过牵引分离定律 (TSL) 分离，这由断裂处理区的材料决定。内聚力的存在消除了裂纹尖端的奇异性，这种奇异性显着影响解的收敛性。描述断裂尖端加工区域的标准模型是假定的在断裂表面之间延伸的结合部分，直到它们在适当的牵引力水平下断裂 (Dugdale, D.S, 1960)。CZM 在预测不同种类材料（如金属、混凝土和岩石）的裂纹扩展方向方面具有很大优势。此外，它已被用于模拟水力压裂与天然裂缝的相互作用。

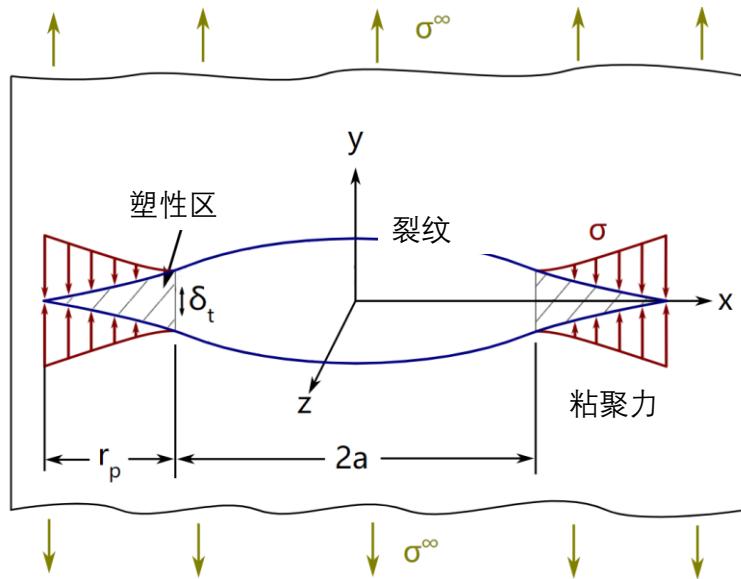


图 46 裂纹尖端的塑性区及内粘聚区模型

7.4.1 基本假设与方程

如图 47 所示, PCDC 在有限元相邻单元之间设置了节理单元, 用来模拟材料的破裂过程。j 节理单元由上下两个节理面组成, 如图 4 所示的节理面 (12) 和节理面 (34) 之间的应力和张开度关系用断裂力学中的内粘聚区模型确定。在经典的内粘聚区模型中, 节理面的法向应力 σ^{coh} 和切向应力 σ^{coh} 分别由公式(63)和(64)确定。如图 48 和图 49 所示, 在公式中(Daisuke Fukuda et al., 2020), 法向张开度 o_p 和剪切位移 s_p 定义了节理从弹性变形进入应变软化的临界点, o 和 $|s|$ 分别定义张开度和剪切位移。由于假设剪应力的大小与剪切位移的方向无关, 因此剪切位移变量取绝对值。在三维节理单元的破裂计算中, 分别计算 II 型断裂和 III 型断裂比较困难, 而是在模拟中将 II 型断裂和 III 型断裂合并在一起作为 II 型断裂处理。 T_s 和 c 分别为节理单元的拉应力强度和粘聚力, 当张开度 $o < 0$ 时表示两节理面相互重合 (overlap), 其重合深度的特征值用 $o_{overlap}$ 表示, 并假设由于重合会产生排斥力, 其排斥力与法向罚刚度(penalty) $P_{overlap}$ 具有线性关系。公式中, P_{open} 、 P_{tan} 则分别是节理单元的法向张开罚刚度、切向罚刚度, 分别用来确定临界法向张开度 o_p 和临界剪切位移 s_p (见公式), h 是节理单元的特征长度。

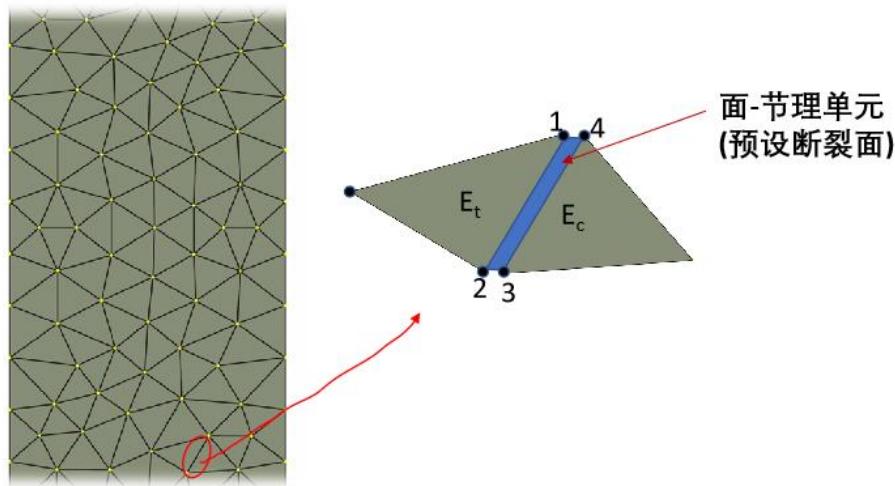


图 47 预设断裂面的面-节理单元

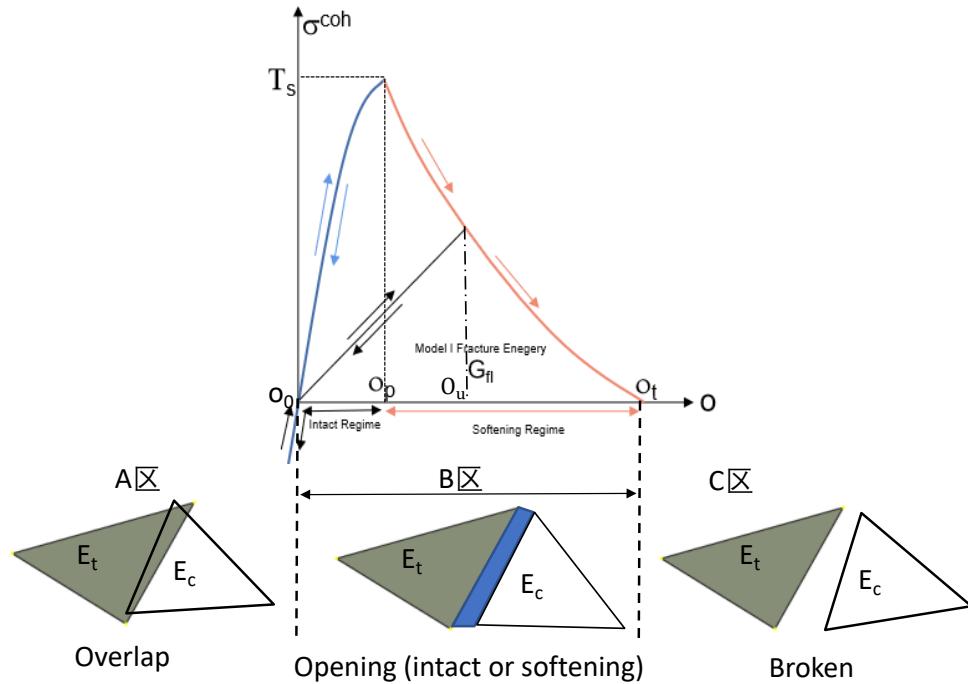


图 48 节理单元的法向应力与张开距离的本构关系 (Modified after Daisuke Fukuda et al., 2020)

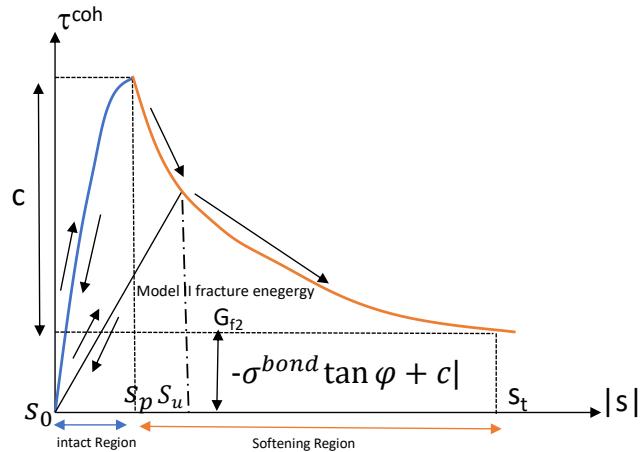


图 49 节理单元的剪切应力与剪切滑动距离的本构关系 (Modified after Daisuke Fukuda et al., 2020)

$$\sigma^{coh} = \begin{cases} \frac{2o}{o_{overlap}}T_s & \text{if } o < 0 \\ \left[\frac{2o}{o_p} - \left(\frac{o}{o_p} \right)^2 \right] f(D)T_s & \text{if } 0 \leq o \leq o_p \\ f(D)T_s & \text{if } o_p < o \end{cases} \quad (63)$$

$$\tau^{coh} = \begin{cases} \left[\frac{2|s|}{s_p} - \left(\frac{|s|}{s_p} \right)^2 \right] (-\sigma^{coh} \tan(\emptyset) + f(D)c) & \text{if } 0 \leq |s| \leq s_p \\ -\sigma^{coh} \tan(\emptyset) + f(D)c & \text{if } s_p < |s| \end{cases} \quad (64)$$

其中，

$$o_p = \frac{2hT_s}{P_{open}} \quad (65)$$

$$s_p = \frac{2hc}{P_{tan}} \quad (66)$$

$$o_{overlap} = \frac{2hT_s}{P_{overlap}} \quad (67)$$

如果罚刚度 $P_{overlap}$ 、 P_{open} 和 P_{tan} 无穷大，则理论上可以得到准确解，但这需要非常小的迭代时间步，从而需要更多的迭代步数，这一方面会在目前的数值计算中带来不现实的时间成本，另一方面，如果节理单元罚刚度与相邻有限元单元的弹性模量相比太悬殊，对后续破裂之后的接触力计算的稳定性也带来较大的影响。数值试验表明，罚刚度的取值为有限元单元的杨氏弹性模量的 10 到 100 倍之间可以在取得计算结果的精确度和耗费较小的计算时间成本之间达到较好的平衡，其中节理的罚刚度 $P_{overlap}$ 在三维计算中有时需要取值为有限元单元的杨氏弹性模量的 1000 倍才能取得更精度的计算结果。

公式中的 $f(D)$ 是表征节理张开及剪切软化曲线的特征函数，其中 D 是破裂因子。下列公式定义的 D 和 $f(D)$ 不仅用于考虑 I 型和 II 型破裂模式，也适用于混合模式 I-II 破裂模式 (Mahabadi et al. 2012; Munjiza et al. 1999)。

$$D = \begin{cases} \text{Minimum} \left(1, \sqrt{\left(\frac{o - o_p}{o_t} \right)^2 + \left(\frac{|s| - s_p}{s_t} \right)^2} \right) & \text{if } o \geq o_p \text{ 或者 } |s| > s_p \\ 0 & \text{if } o < o_p \text{ 和 } |s| \leq s_p \end{cases} \quad (68)$$

$$f(D) = \left[1 - \frac{A+B-1}{A+B} \exp \left(D \frac{A+CB}{(A+B)(1-A-B)} \right) \right] [A(1-D) + B(1-D)^c] \quad (0 \leq D < 1) \quad (69)$$

其中 A、B 和 C 是确定软化曲线形状的系数，通常应该由试验确定，但数值计算试验表明，软化曲线的形状对计算结果影响不大 ()，因此在该本构模型中，我们将 A、B 和 C 定义为常量，分别等于 0.63、1.8 和 6.0。 o_t 和 s_t 分别是张开度和剪切位移的极限临界值，超过该极限临界值，节理断裂并且成为宏观断裂。 o_t 和 s_t 与 I 型和 II 型断裂能 G_{f1} 和 G_{f2} 的关系如下：

$$G_{f1} = \int_{o_p}^{o_t} \sigma^{coh} o do \quad (70)$$

$$G_{f2} + W_{res} = \int_{s_p}^{s_t} (\tau^{coh} |s|) d|s| \quad (71)$$

在软化阶段还需要考虑卸载，卸载情况下的法应力与剪切应力计算公式如下：

$$\sigma^{coh} = f(D) T_s \frac{o}{o_u} \quad \text{if } o_u > o_p, \quad 0 < o < o_u \quad (72)$$

$$\tau^{coh} = \{-\sigma^{coh} \tan \emptyset + f(D)c\} \frac{|s|}{s_u} \quad \text{if } |s| < s_u, \quad s_u > s_p \quad (73)$$

计算得到的 σ^{coh} 和 τ^{coh} 之后，需要将得到的应力值转化到节理单元的节点上。PCDC2D 利用三点高斯积分法进行转化，PCDC3D 则可以根据计算精度要求选择 3 点或 7 点高斯积分法做转化。

7.4.2 本构模型输入参数

节理单元的内粘聚区模型的关键词为“c{classic}-i{intrinsic}-c{cohesive}-i{interface}”，其主要输入参数及对应的命令关键词如下表所示：

表 9 节理单元的内粘聚区模型的输入参数

参数	符号	关键词	数据类型	单位
摩擦角	ϕ	F{riction}	浮点	°
粘聚力	c	c{cohesion}	浮点	Pa
抗拉强度	T_s	t{ensile}-s{strength}	浮点	Pa
I型断裂能	G_{f1}	gf1	浮点	N/m
II型断裂能	G_{f2}	Gf2	浮点	N/m
法向重合罚刚度	$P_{overlap}$	p{enalty}-o{verlay}	浮点	Pa
法向张开罚刚度	P_{open}	p{enalty}-n{ormal}	浮点	Pa
剪切罚刚度	P_{tan}	p{enalty}-s{hear}	浮点	Pa
高斯积分点数*		np	整型	—

*注意：表中高斯积分点数只能在 PCDC3D 中设置

7.4.3 算例一：直接拉裂破坏的模拟

本算例用来验证直接拉裂破坏时的拉应力由定义的内粘聚区模型的拉应力强度确定。模型为如图 50 所示的“狗骨头”形状的岩样，由于是试验室尺寸，因此所有几何和力学参数均用毫米(mm)级。岩样的上下两边施加拉应力，加载速度 $v=0.005\text{mm/s}$ 。岩样几何尺寸为宽度 $W=50\text{mm}$ ，高度 $H=150\text{mm}$ ，半径 $R=150\text{mm}$ 。岩样的内粘聚区模型的主要力学参数如下：

摩擦角：45°

粘聚力：25 MPa

抗拉强度：2 MPa

I型断裂能：0.1 $\mu\text{N/mm}$

II型断裂能：200 $\mu\text{N/mm}$

其中，I型断裂能取得足够小，因此在理论上，试样的破坏应该由抗拉强度确定。给节理 (face-

`joint`) 赋内粘聚区模型后, 模型的单元与单元之间共有的面将自动转化为具有上下两个节理面的节理单元。

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\Mechanical\DirectTension\”, 找到并打开工程文件“DirectTension_2d.prj”, 运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“DirectTension_2d.sc”, 得到如图 51 和

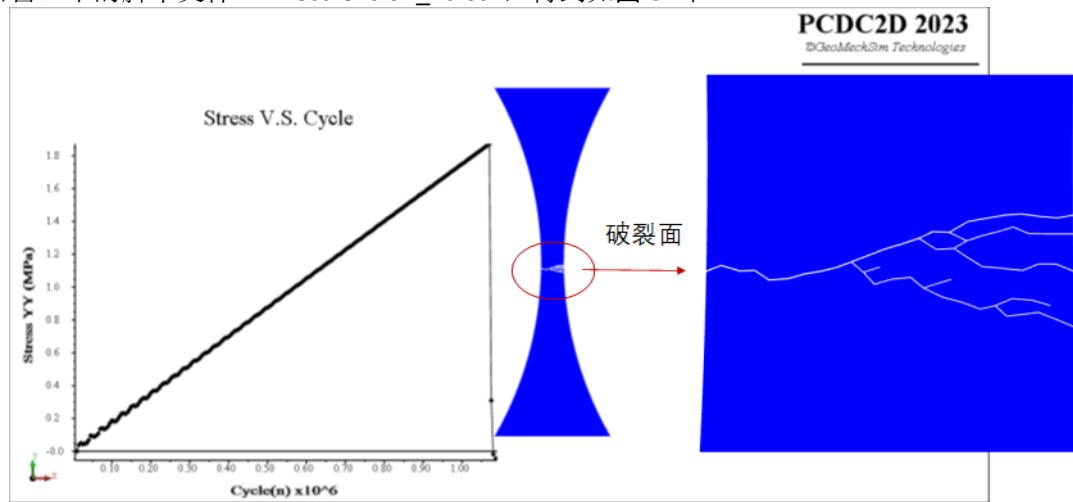


图 52 所示的结果。其中, 图 51 显示在临近拉裂破坏时在垂直方向上的应力云图, 岩样中间部分的垂直拉应力大约 1.7 MPa; 图 52 则显示岩样破坏时的应力及形态, 岩样在中间最窄处出现水平向裂纹, 而破坏时的拉应力则接近内粘聚区模型定义的抗拉强度 2 MPa。

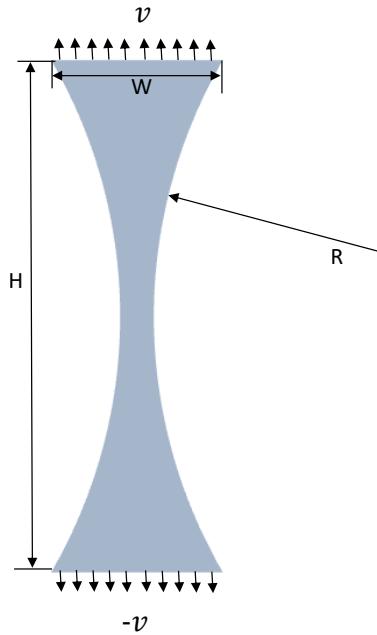


图 50 试样几何形状 (上下两边速度边界条件)

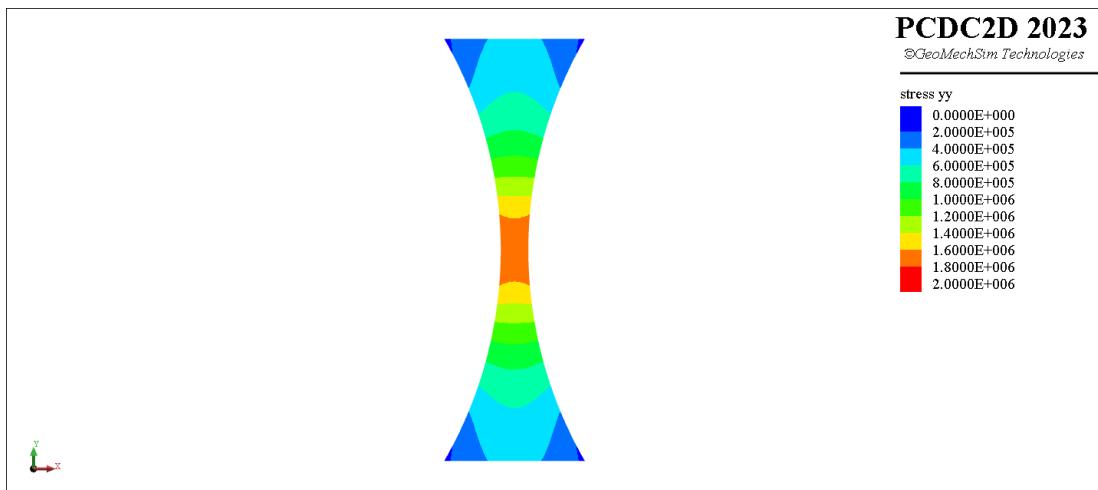
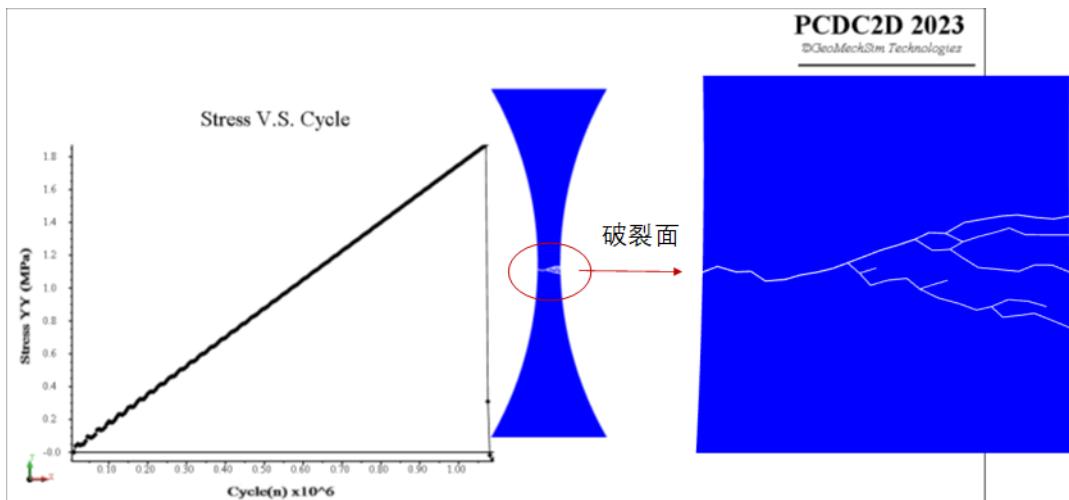
图 51 试样运行到 $1\text{e}6$ 步时的 Y 方向上应力云图

图 52 试样破坏形态以及中间面破坏时的应力

7.4.4 算例二：钻孔的爆破模拟

该算例模拟多个钻孔在动荷载作用下，钻孔围岩的破裂过程以及应力波的传播过程。模型如图 53 所示，在具有初应力的区域开挖出三个钻孔，将具有爆破特征的动荷载按钻孔 1、2 和 3 的顺序加载到三个钻孔的内壁上。该算例演示：

- 1) 赋初应力后，如何快速达到力学平衡？
- 2) 如果用“松弛”弹性模量的方法模拟准静态开挖？
- 3) 如何用二维表（table）给钻孔内壁加动荷载？
- 4) 如何保存计算结果的图片？

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\Mechanical\BoreholeBlasting\”，找到并打开工程文件“BoreholeBlasting_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“BoreholeBlasting_2d.sc”，得到如图 54 所示的速度云图，云图显示了应力波传播及裂纹生成扩展过程。在脚本文件中，模拟的顺序如下：

- 1) 首先定义几何变量、模型参数和计算控制参数变量，方便做参数化研究；
- 2) 根据定义的几何变量生成数值计算模型。分区域剖分单元，在钻孔附近生成更密的网格，以

提高精度；

- 3) 给模型单元赋弹性本构模型，并施加边界条件和初应力，然后进行静力和非接触碰撞计算，方便快速达到静力平衡状态。注意，此时并没有给面-节理赋内粘聚区模型和进行接触力计算。
- 4) 给面-节理赋内粘聚区模型并打开接触力计算和动力计算开关，计算并达到一定的平衡。
- 5) 模拟钻孔的开挖：分为两步。第一步是利用函数对开挖单元的弹性模量进行逐步的“松弛”计算（脚本中“松弛”函数为“m_Relaxing”），第二步是将开挖单元设为空单元（如果单元的本构模型关键词为 null，表示该单元被开挖）。其目的是在较大开挖释放应力（由于假设的较大初应力）的情况下，模拟准静力开挖过程。否则，没有适当的“松弛”，一次就设置为开挖单元可能出现较大的动力破坏，产生与实际准静态开挖过程不符的裂纹。
- 6) 最后模拟钻孔的爆破：首先定义三个二维表(table)，每个表定义了随时间的应力变化值，也就是简化的随时间的爆破动荷载值。然后给三个钻孔的内壁单元-面施加应力边界条件，该应力边界条件设置为定义的二维表（table）名称，而不是常量。
- 7) 模拟钻孔爆破的计算利用循环语句，每 100 步计算输出并保存给定的视图为图片。这些保存的图片可以利用计算机操作系统 Windows 自带的程序“photo（图片）”制作动画视频。

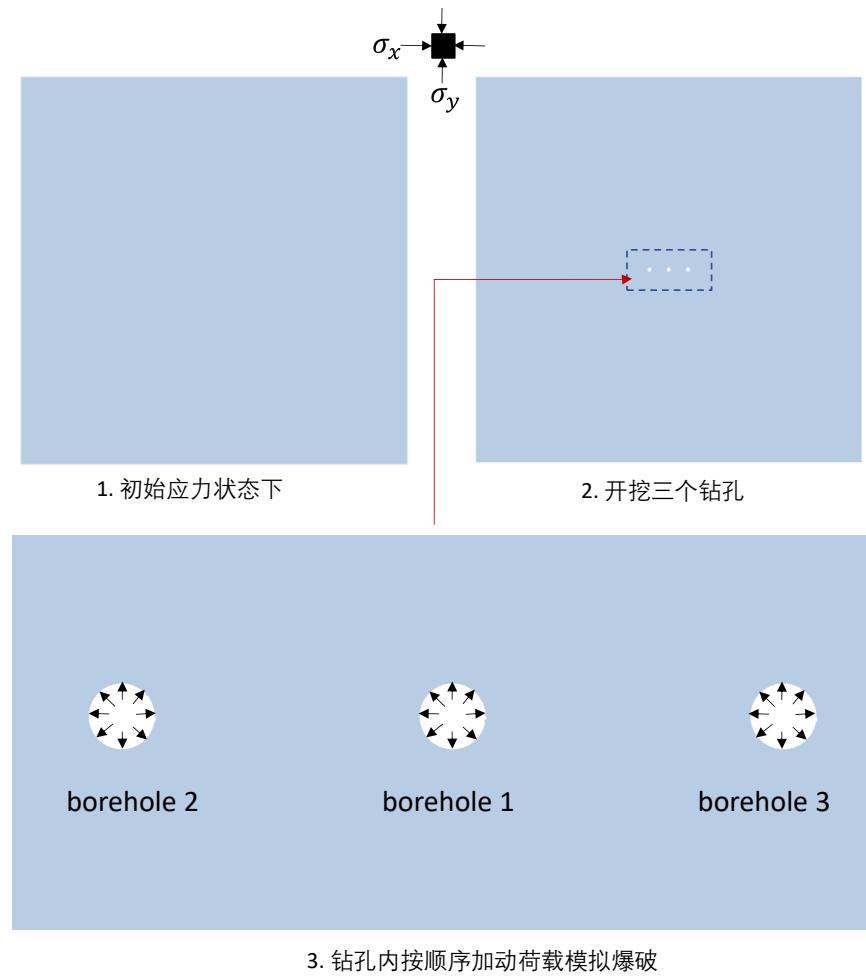


图 53 钻孔爆破模拟的模型

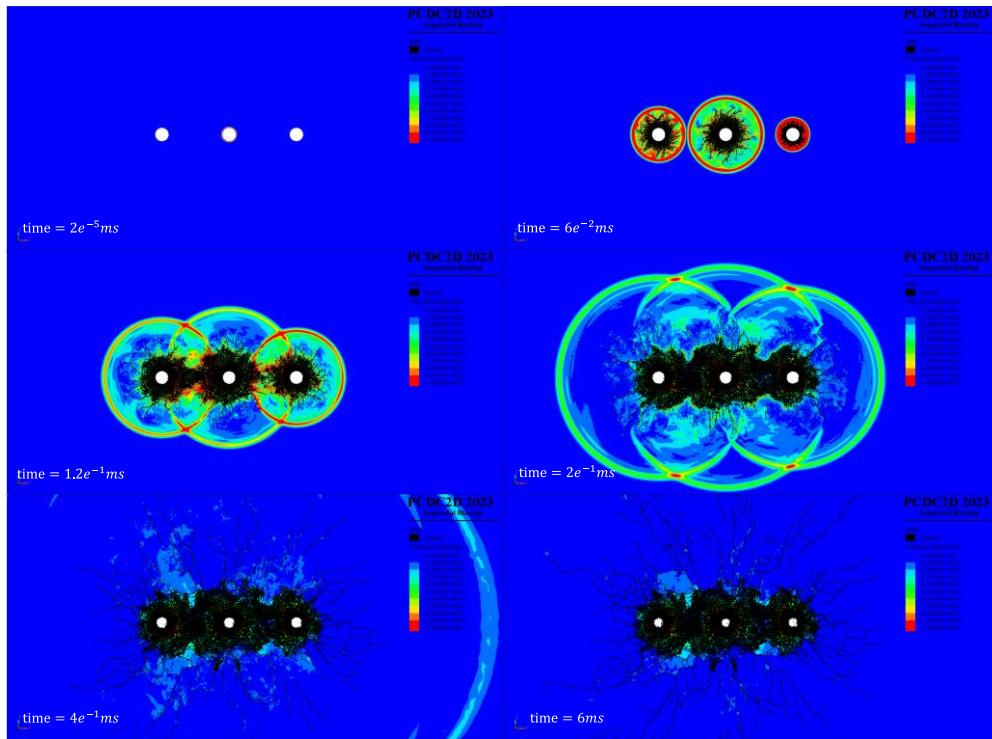


图 54 模拟的速度云图（显示应力波和裂纹随时间的变化和扩展过程）

7.5 裂隙流体力学计算

在 PCDC 程序中，流体在模型中的渗透流动是通过假设虚拟或实际的流体网络中进行的。如图 55 和图 56 所示，在数值计算中，流体流动网络被离散成与二维或者三维的固体单元之间的预设节理重合的一维或者二维流通道（flow channel），每个流通道单元由两个或三个流节点（flow node）组成。不管节理实际开裂或未开裂，裂隙水都假设是在预设的节理中流动。如果节理未开裂，流通道则是虚拟的，可以通过设置合适的虚拟裂隙张开度，模拟体现实际岩体的宏观渗透效果；如果节理是开裂的，流通道则可以模拟裂隙水在实际裂隙中的流动。裂隙水在流通道中的流动假设为粘性（牛顿）层流（viscous laminar flow），流动规律符合 Darcy 定律，流通道中的流体压力可以通过数值计算获得，流体压力作为外力作用在固体单元节点上，使固体发生连续或非连续变形，从而改变裂隙流通道的张开度，进而引起裂隙流体压力与固体变形之间的相互作用体现了裂隙流体与固体力学之间的耦合。

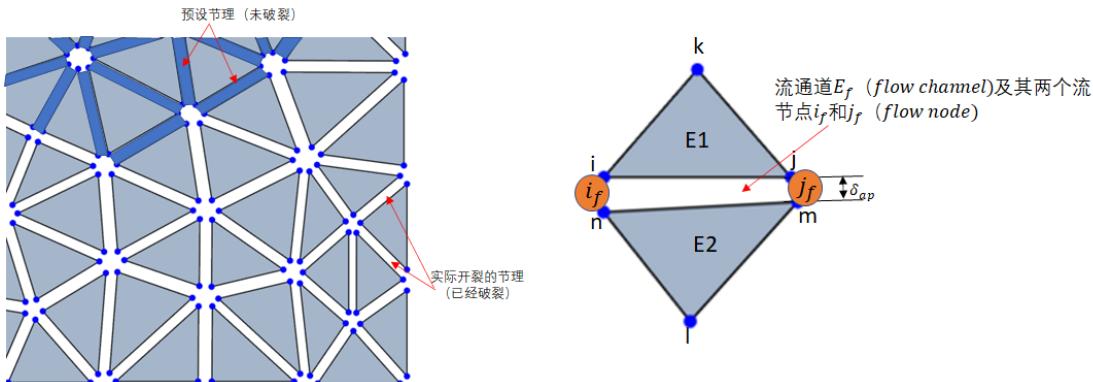


图 55 二维裂隙（开裂或未开裂）流通道

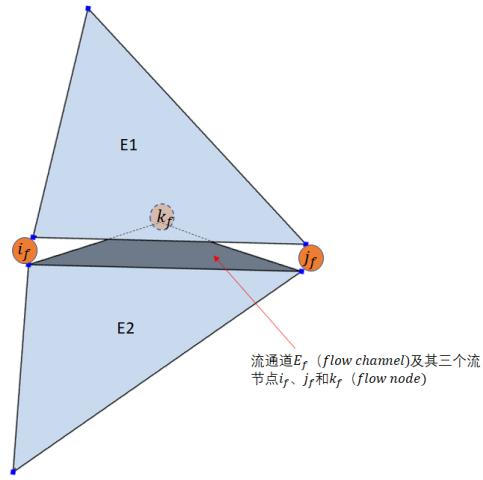


图 56 三维裂隙（开裂或未开裂）流通道

7.5.1 裂隙流体的压力计算

和固体有限元离散类似，裂隙流体网络离散为流通道和流节点，流通道中的流体质量根据裂隙张开度计算，并且分配到节点上，流体压力作为求解变量，也假设作用在流通道的节点上。对于未开裂的节理，其中的流通道可以假设有一个虚拟的张开度，其值可以通过数值计算与试验结果进行标定。假定节点上的裂隙流体的水头为 $\phi_{f,h,i}$ （PCDC2D 中， $i=1$ ；PCDC3D 中， $i=2$ ），并且水头呈线性分布，即 $\frac{\partial \phi_{f,h}}{\partial x_i}$ 为常量。类似 3.3 中固体单元应变公式的推导方法，可以得到，

$$\frac{\partial \phi_{f,h}}{\partial x_i} = -\frac{1}{\Omega N_{dim}} \sum_{f=0}^{N_{dim}} \phi_{f,h,f} n_i^{(f)} s^{(f)} \quad (74)$$

其中， $N_{dim}=1$ （一维线流通道）或者 2 （二维三角形流通道）， $\phi_{f,h,f} = z + p_f / (\rho_f g)$ 为节点 f 上的总水头（ p_f 为节点上流体应力， ρ_f 是流体密度， g 是重力加速度）， $n_i^{(f)}$ 和 $s^{(f)}$ 为流通道单元的顶点 f 对面边界的外法向方向矢量和特征尺度。一维情况下， $\Omega = L_f$ （ L_f 为流通道长度）， $s^{(f)}=1$ 。在流通道的局部坐标系下， $n_i^{(f)}=1$ 或者 -1 。二维情况下， $\Omega = A_f$ （ A_f 为流通道的面积）， $s^{(f)}$ 为节点 f 对面三角形边的流通道的长度。

根据达西定律的（Darcy's law），理想化为两平行板之间流动的裂隙流在 i 方向的 1 单位宽度的体积流量为：

$$q_{f,i} = -\frac{\delta_{ap}^3 \rho_f g}{12 \mu_{f,d}} \frac{\partial \phi_{f,h}}{\partial x_i} \quad (75)$$

其中， δ_{ap} 是裂隙的水力张开度， $\mu_{f,d}$ 是流体动态粘度系数。在计算中，经常会用到流体的运动粘度系数 $\mu_{f,k}$ ， $\mu_{f,k}$ 和 $\mu_{f,d}$ 关系如下：

$$\mu_{f,k} = \mu_{f,d} \rho_f \quad (76)$$

裂隙水的渗透系数和流速分别为：

$$k_f = \frac{\delta_{ap}^2 \rho_f g}{12} \quad (77)$$

和

$$v_{f,i} = \frac{q_{f,i}}{\delta_{ap}} \quad (78)$$

裂隙的水力张开度 δ_{ap} 并非常量，其与节理单元法向方向的平均张开度 $\bar{\delta}_{j,n}$

的关系如图 57 所示，用公式表示为：

$$\delta_{ap} = \delta_{ap}^0 + \bar{\delta}_{j,n} \quad (79)$$

其中， δ_{ap}^0 是节理的初始水力张开度，其物理含义在一定程度上取决于流通道是实际破裂的节理还是完整部分（即多孔介质）。如果流通道是实际破裂的节理， δ_{ap}^0 等于在发生任何外力变形之前的实际破裂的节理的张开度。相反，如果流通道用来模拟无实际破裂节理的多孔介质的流动， δ_{ap}^0 需要调整标定为能匹配多孔介质的宏观渗透率的值。 δ_{ap}^{max} 和 δ_{ap}^{min} 定义为流通道的最大和最小值，在这些界限值之外，假设节理的闭合和张开对流体在节理中的流动没有影响。由于节理法向罚参数所代表的有限接触刚度，节理单元在压荷载下略有重叠。因此，需要一个正的 δ_{ap}^{min} 值，以避免在数值公式中出现除以零的情况。另外，数值计算表明，过大的水力张开度需要很小的计算时间步长以避免计算的发散。为了提高数值计算效率，通常设置一个最大水力张开度 δ_{ap}^{max} 。

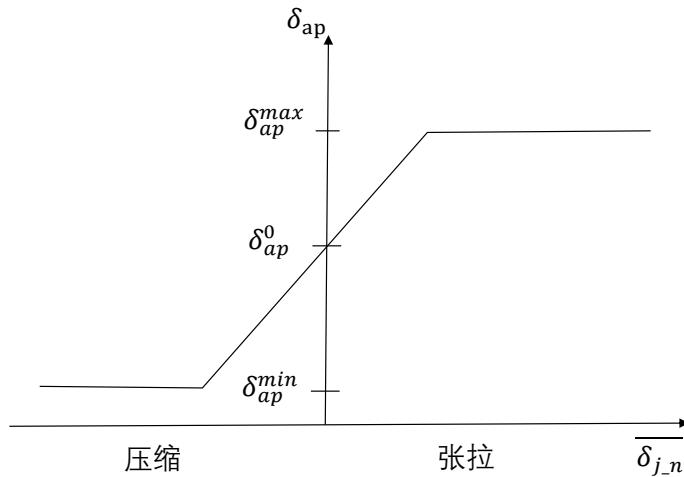


图 57 节理的平均法向张开度与流通道中的水力张开度的关系

公式(75)适用于流通道中的流体饱和度为 1 的情况下，如果流体饱和度小于 1，节点中的流体压力为零，根据该公式计算得到的 $q_{f,i}$ 为常量，实际上情况下，如果流体饱和度小于 1，流通道中的 $q_{f,i}$ 应该随着流体饱和度的减小而减小。因此，为了反映流体饱和度对体积流量的影响，公式(75)修正为：

$$q_{f,i} = -\frac{\delta_{ap}^3 \rho_f g}{12 \mu_{f,d}} \frac{\partial \phi_{f,h}}{\partial x_i} f_f(\bar{s}_f) \quad (80)$$

$$f_f(\bar{s}_f) = \bar{s}_f^2 (3 - 2\bar{s}_f) \quad (81)$$

其中 \bar{s}_f 是流通道单元的节点的饱和度的平均值。

流体单元 m 中的任意节点 i 从该流体单元中获得的流量增量由与该节点相连的该流体单元面上的流量增量的平均相加获得：

$$\Delta Q_{f,m,l} = -\frac{1}{N_{dim}} q_{f,i} n_i^{(l)} s^{(l)} \delta_{ap} \quad (82)$$

假定有 n 个流通道与节点 l 相连，进一步得到从与该节点相连的所有流通道单元中流入该节点的流量为

$$\Delta Q_{f,l} = \sum_{j=0}^n \Delta Q_{f,j,l} \quad (83)$$

该节点中的流体压应力根据节点中流体的质量守恒定律，由下列公式计算：

$$p_{f,l,t+\Delta t} = p_{f,l,t} + K_f \Delta Q_{f,l} \frac{\Delta t}{V_{f,l,t+\Delta t}} - K_f \frac{V_{f,l,t+\Delta t} - V_{f,l,t}}{0.5 * (V_{f,l,t+\Delta t} + V_{f,l,t})} \quad (84)$$

其中， $p_{f,l,t+\Delta t}$ 和 $V_{f,l,t+\Delta t}$ 分别为流节点 l 在当前计算时间 ($t + \Delta t$) 的流体压应力和体积， $p_{f,l,t}$ 和 $V_{f,l,t}$ 则为流节点 l 在上一步计算时间 (t) 的流体压应力和体积。 K_f 为流体的体积模量。如果计算的 $p_{f,l,t+\Delta t}$ 小于零，则设置 $p_{f,l,t+\Delta t} = 0$ 。如果 $p_{f,l,t+\Delta t} = 0$ ，那么节点中的流体饱和度需要根据下列公式计算：

$$s_{f,l,t+\Delta t} = s_{f,l,t} + K_f \frac{\Delta t}{V_{f,l,t+\Delta t}} - \frac{V_{f,l,t+\Delta t} - V_{f,l,t}}{0.5 * (V_{f,l,t+\Delta t} + V_{f,l,t})} \quad (85)$$

得到各节点上的压应力计算后，假设流通道上的压应力是线性分布的，因此，可以进一步求得各节点上的流体压力，作为外载荷加到与流节点对应的固体单元的节点上。

流体损失 (leakoff) 计算

水力压裂过程中部分流体会沿流通道渗透到周围介质中，计算这种流体损失的一种常见方法是使用卡特方程 (Carter's equation)，该方程基于多孔介质中一维流体流动的解 (Valko 和 Economides, 1999)。这种方法假设从每个流通道沿着垂直于流通道的方向发生流体损失，流通道单元中的流体质量损失速率等于

$$q_{leak} = \frac{\rho_f L_f C_{leak}}{\sqrt{t - t_i}} \quad (86)$$

其中， L_f 是流通道的长度， t 是当前水力计算时间， t_i 是流通道开始向周围介质泄漏损失液体的水力计算时间（假设等于节理破裂的时间）； C_{leak} 是从流通道到周围介质的泄漏系数， C_{leak} 根据下式估算：

$$C_{leak} = \begin{cases} (p_f - p_s) \sqrt{\frac{k_s n_{s,p} (C_f + C_{s,p})}{\pi \mu_{f,d}}} & \text{if } p_f \geq p_s \\ 0 & \text{if } p_f < p_s \end{cases} \quad (87)$$

其中， p_f 和 C_f 分别是流通道中的水压力和可压缩性系数 ($C_f = 1/K_f$)；而 p_s 和 $C_{s,p}$ 分别为基质中的孔隙压力与孔隙压缩系数， k_s 和 $n_{s,p}$ 分别是基质的渗透系数及基质孔隙率。

使用显式时间积分方法，每个流节点损失的流体体积增量的计算公式如下：

$$\Delta Q_{leak} = f(s) \frac{q_{leak} \Delta t}{\rho_f} \quad (88)$$

将 ΔQ_{leak} 加入到(83)式中，再根据(84)式就可以得到流体泄露情况下的节点流体压应力。

7.5.2 流-固 (H-M) 耦合计算

流-固 (H-M) 耦合计算是在每一步计算时间里交替进行固体的力学求解和裂隙水的流动计算。该方法是完全耦合的或者称为双向耦合模式：力学计算受到流体压力的影响，计算得到的流节点上的流体压力作为外载荷施加在有限元单元的节点上；而流动计算受到由固体变形和断裂过程引起的节理中流通道形状的变化的影响。

在耦合计算中，由于固体力学和裂隙流体力学过程之间时间尺度的差异（例如，毫秒级与分钟级），一般在模拟中，每一步迭代计算需要定义一定的裂隙流体力学计算步与时间步长，以及需要执行多个固体力学计算步与时间步长。如果要保持准静态加载条件，与每个裂隙流体力学相应的计算步的固体力学计算步数和时间步长应使得固体力学计算达到平衡。

模拟也可以以单向耦合模式运行，其中更新的模型几何（即节点坐标）被传递给裂隙流体计算，但流体计算的压力场不传递回到固体力学计算。该模式可以用于分析固体力学加载情况下的裂隙流体运动特性。

7.5.3 本构模型输入参数

裂隙流体本构模型“hydr{aulic}-p{orous}-m{edium}”的输入参数如下表所示：

表 10 “hydr{aulic}-p{orous}-m{edium}”本构模型输入参数、关键词及数据类型表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
流体密度	ρ_f	f{luid}-den{sity}	浮点	kg/m^3
流体体积模量	K_f	f{luid}-b{ulk}	浮点	Pa
流体运动粘度系数	μ_{f_k}	vis{cosity}	浮点	m^2/s
初始水力张开度	δ_{ap}^0	a{perature}-i{nitial}	浮点	m
最小水力张开度	δ_{ap}^{min}	a{perature}-min{umum}	浮点	m
最大水力张开度	δ_{ap}^{max}	a{perature}-max{imum}	浮点	m
是否计算流体损失		leak-off	布尔	—
基质孔隙压力	p_s	m{atrix}-p{ore}-p{ressure}	浮点	Pa
基质渗透系数	k_s	m{atrix}-p{ermeability}	浮点	m^2
基质孔隙压缩系数	C_{s_p}	m{atrix}-p{orosity}-c{ompressibility}	浮点	Pa^{-1}
基质孔隙率	n_{s_p}	m{atrix}-p{orosity}	浮点	—

如果 Leak-off 取值为 true (或者 on)，则会模拟计算节理在流体压力作用破裂后向基质渗流导致流

体损失，同时需要输入与之相关的参数，比如基质渗透系数、基质孔隙压缩系数和基质孔隙率等，否则不需输入这些参数。leak-off 的省缺值是 false

7.5.4 边界条件输入参数

裂隙流体计算的边界条件“hydra{ulic}-c{onstant}-f{low}-b{oundary}”的输入参数如下表所示：

表 11 “hydra{ulic}-c{onstant}-f{low}-b{oundary}”边界条件输入参数、关键词及数据类型表

参数	关键词	数据类型	单位
流体压力	p{ressure}	浮点	Pa
流体表面位置坐标	f{low}-s{urface}	浮点	m
体积流量	f{low}-r{ate}	浮点	m^3/s

该边界条件输入到节点对象上。其中，流体面的坐标位置一般位于输入节点对象的上方。

7.5.5 算例一：流体压力下的环向试样中稳定流模拟

该算例用来计算环向试样在内、外流体压力的作用下产生渗流，并达到稳定状态下试样中的流体压力分布。如图 58 所示圆环，内、外半径分别为 r_i 和 r_o ，内、外半径的界面法向方向分别受均布的流体压力 p_i 和 p_o 的作用。达到稳定状态下的、沿圆环径向半径 r 分布的流体压力分布的解析解如下（Fjaer et al.,2008）：

$$p(r) = p_i + \frac{p_o - p_i}{\ln(r_o/r_i)} \ln\left(\frac{r}{r_i}\right) \quad (89)$$

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\hydraulic\SteadyRadialFlow\”，找到并打开工程文件“SteadyRadialFlow_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“SteadyRadialFlow_2d.sc”，得到如图 59 所示的计算结果。图中绘制了流体应力云图、以及流体应力沿圆环径向半径 r 分布的解析解与数值解对比。从对比中可以看到，数值解与解析解吻合良好。

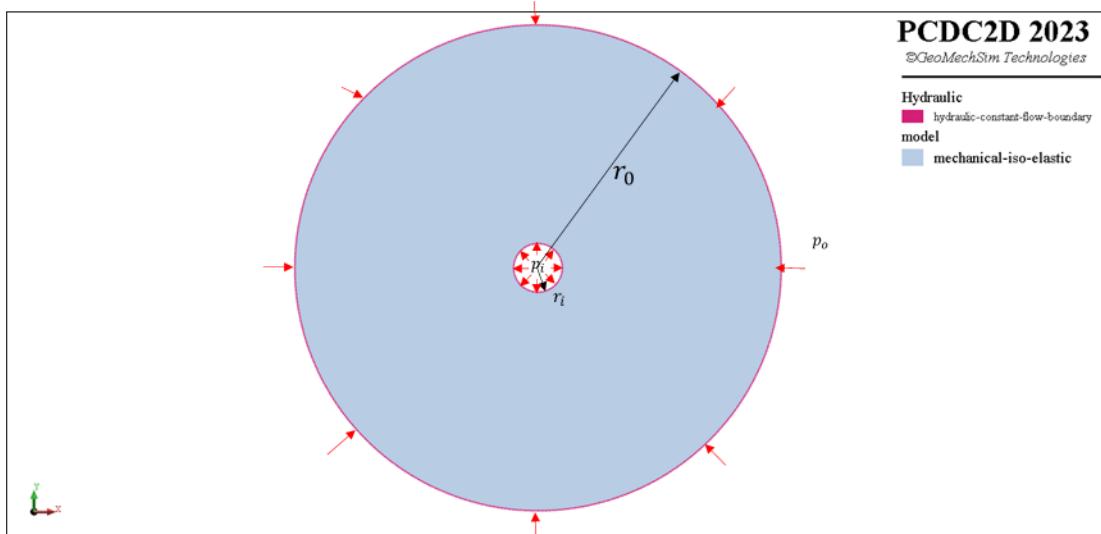


图 58 环状试样在内、外流体压力的作用下产生渗流的模型

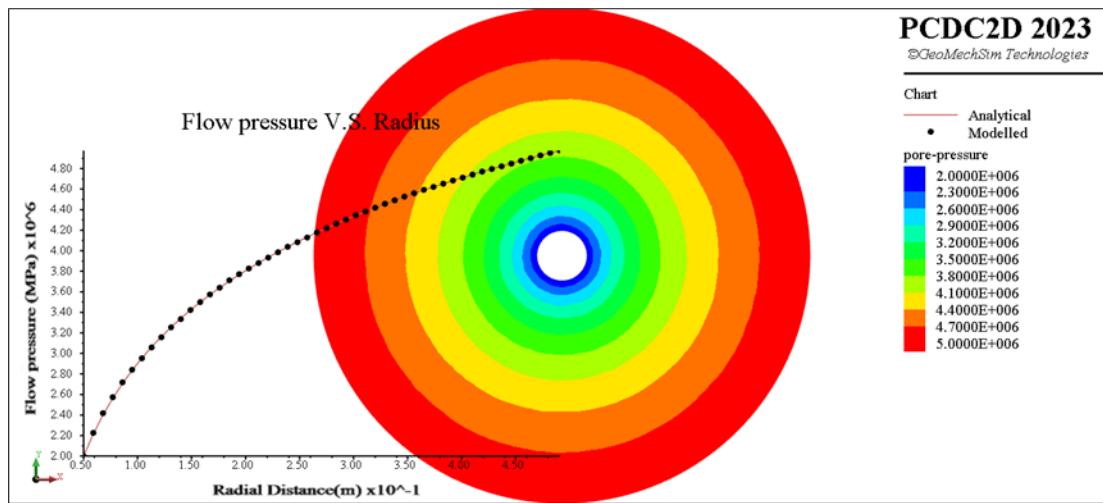


图 59 模拟在稳定状态下的流体压力分布云图以及模拟结果与理论中对比（环向半径位置的理论值和模拟值分别用图表中的曲线和点表示）

7.5.6 算例二：裂隙岩体中的稳定流模拟

如图 60 所示，给定上下游水头 h_l 和 h_r ，求解上下游之间的裂隙岩体在渗流稳定状态下的自由水流表面位置。根据 Dupuit's 假设 (Harr, 1962)，自由渗流的流体位置的解析解为：

$$y(x) = \sqrt{h_l^2 - \frac{h_l^2 - h_r^2}{L}} \quad (90)$$

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\hydraulic\SteadyStateUnconfinedFlow\”，找到并打开工程文件“SteadyStateUnconfinedFlow_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“SteadyStateUnconfinedFlow_2d.sc”，得到如图 61 所示的渗流稳定状态下的裂隙岩体流体压力云图。计算结果显示模拟值与解析值吻合良好。

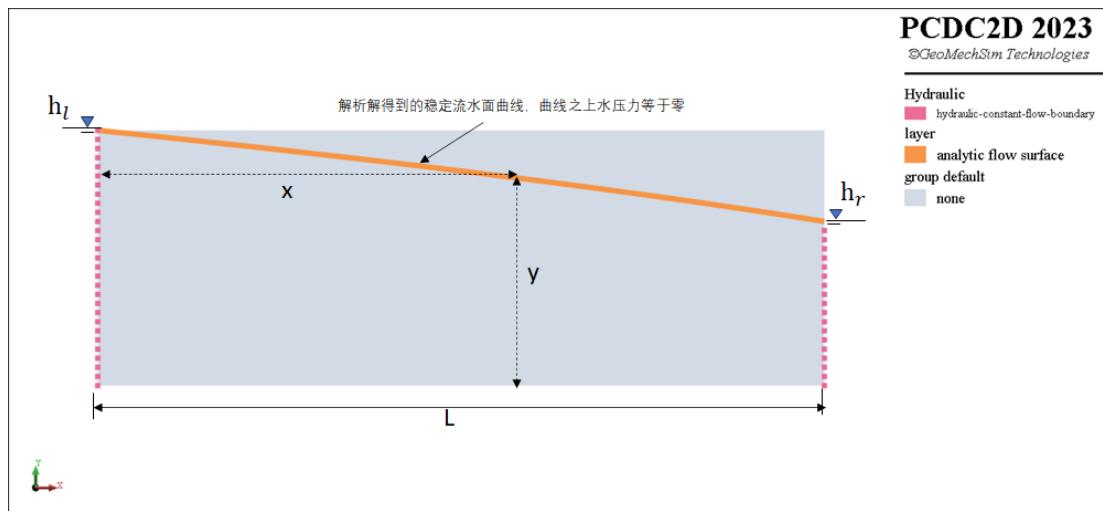


图 60 上下游水头给定情况下的渗流计算模型

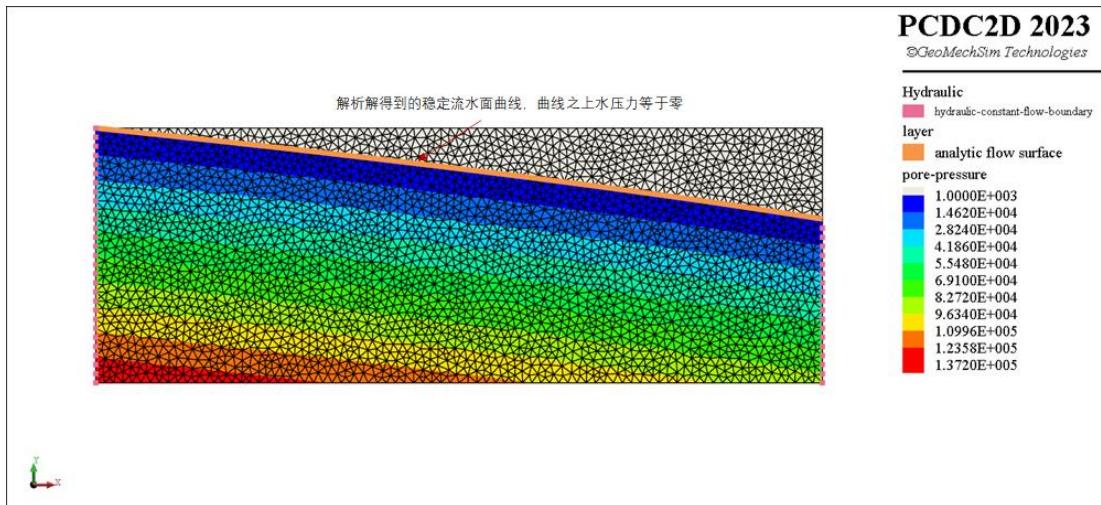


图 61 模拟渗流稳定状态下的流体压力云图显示模拟值与解析值吻合良好

7.5.7 算例三：裂隙中瞬态流模拟

该算例用来模拟验证流体在具有一定张开度的裂隙中流动产生的瞬态压力。如图 62 和图 63 所示，在试样中间位置 AC 线上，是一条具有一定张开度 δ_i 的长裂纹，A 点处施加恒定的流体压力 p_A ，假设试样和 C 点不透水，试样长度为 L ，流体的密度、体积模量和流体运动粘度系数分别为 ρ_f 、 K_f 和 $\mu_{f,k}$ 。在给定参数和边界条件下，裂隙中任何一点 x 在时间 t 时刻的压力的解析解为 (Carslaw and Jaeger, 1959)：

$$p(x, t) = p_A \left\{ 1 + \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left[e^{-(2n+1)^2 \frac{T}{4\pi^2}} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2}\xi\right) \left(\frac{(-1)^{n+1}}{2n+1} \right) \right] \right\} \quad (91)$$

其中， $\xi = (1-x)/L$ 。

$$T = \frac{K_f \left(\frac{\delta_i^2}{12\mu_{f,k}\rho_f} \right) t}{L^2} \quad (92)$$

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\hydraulic\TransientFlowThroughFracture\”，找到并打开工程文件“TransientFlowThroughFracture_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“TransientFlowThroughFracture_2d.sc”，得到如图 64 所示的计算结果。图表中显示的在 B 点和 C 点的瞬态流体压力模拟值与解析值吻合良好。

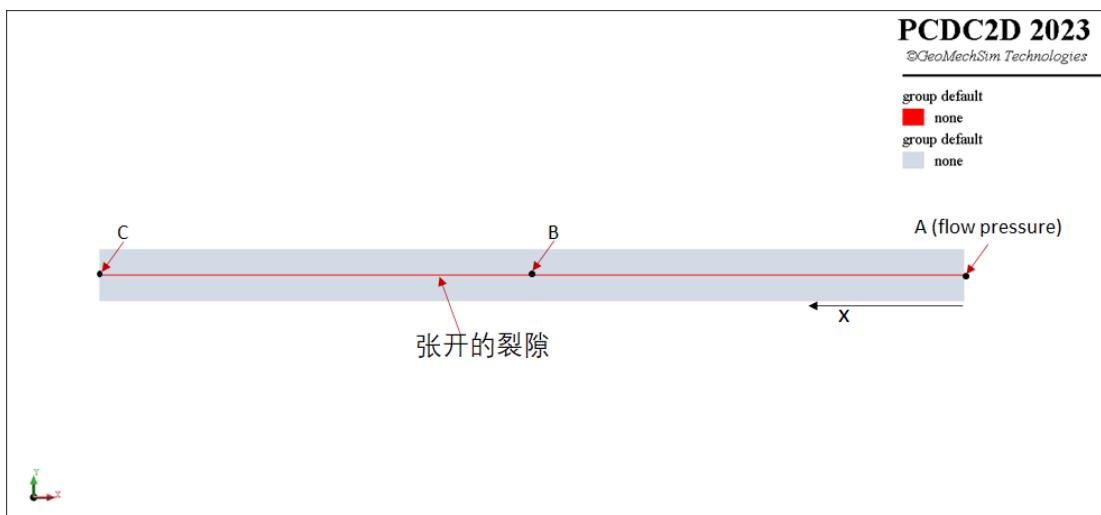


图 62 流体在右边 A 点的流体压力下在中间的张开裂隙的流动模型

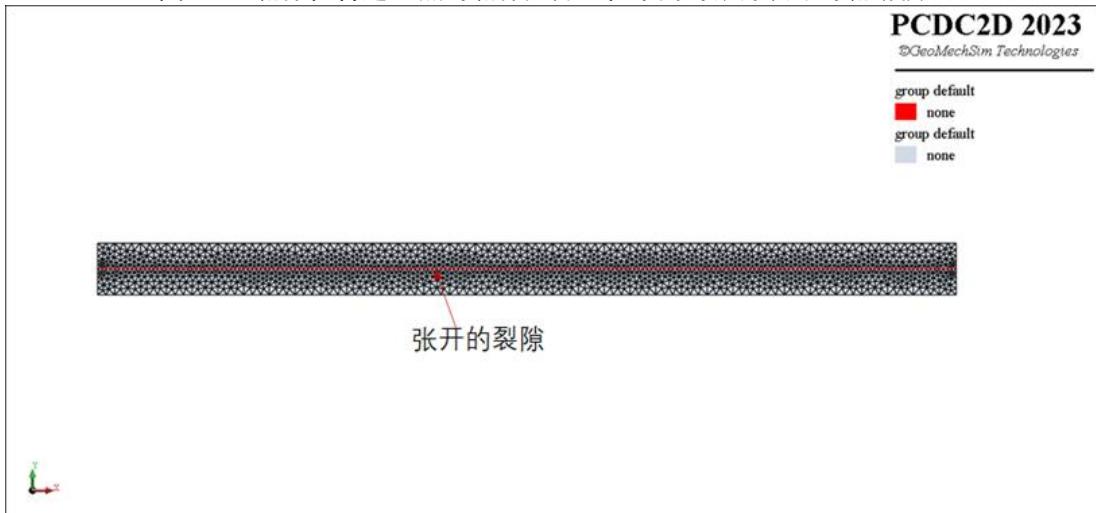


图 63 模型有限元单元网格以及中间的流单元网格

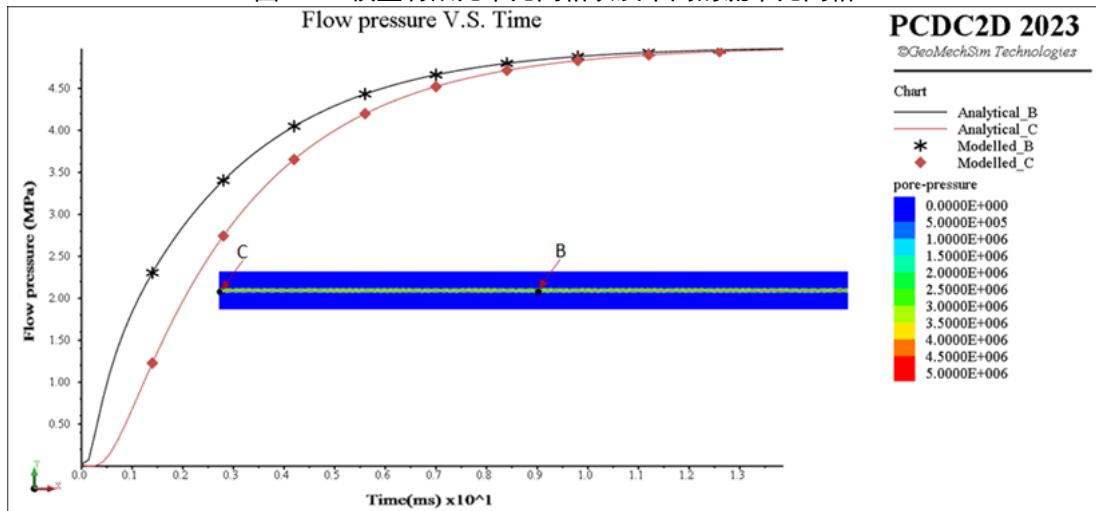


图 64 裂隙中的瞬态流体压力云图以及瞬态模拟值与解析值的对比（图表中 B、C 两点处的瞬态流体压力的解析解和模拟值分别用曲线和点或星号表示）

7.5.8 算例四：水力致裂的模拟

该算例演示模拟一个简单的水力致裂过程。如图 65 所示，具有初始应力的围岩中间一点注入给定流量的流体，围岩将在持续流体注入的情况下，由于流体压力的作用，导致围岩中裂纹的产生和扩展。

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\hydraulic\FluidInjection\”，找到并打开工程文件“FluidInjection_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“FluidInjection_2d.sc”。图 66 是运行脚本生成的模型计算网格；图 67 显示在不同计算步数时裂纹产生或扩展的形态、以及围岩中产生的水压力分布云图。由于给定的沿 X 方向的初始压应力大于沿 Y 方向的初始压应力，因此可以看到模拟的裂纹沿 Y 方向张开，裂纹尖端沿 X 方向扩展。

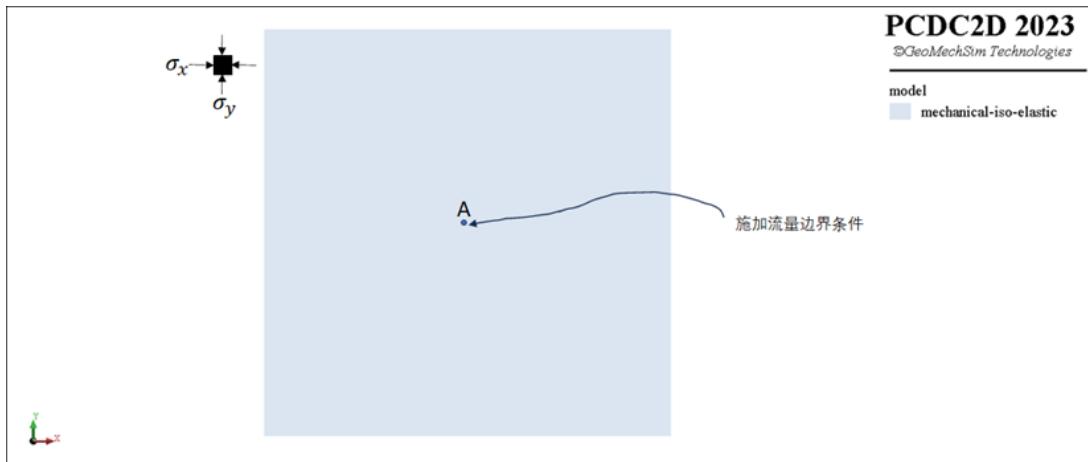


图 65 模拟围岩在中间 A 点处施加恒定流量下作用下破裂过程的模型

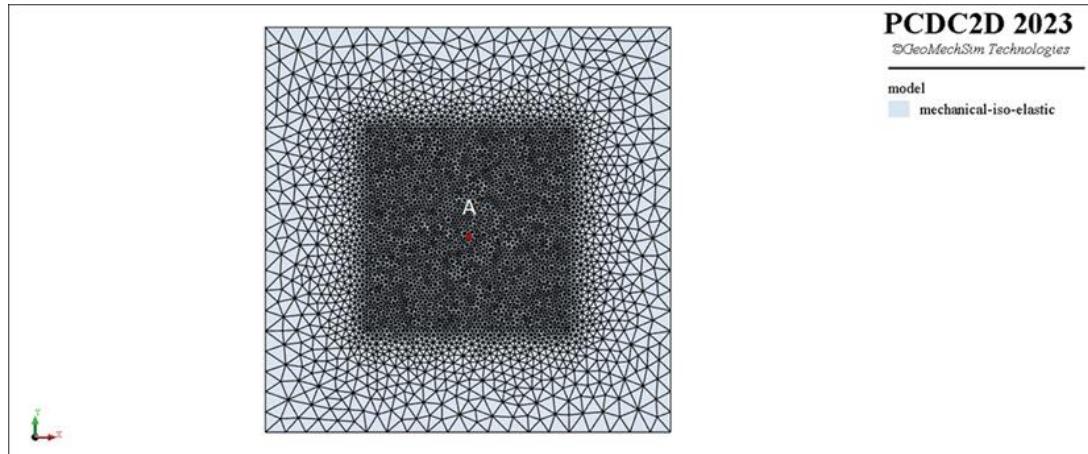


图 66 水力致裂模型的有限元网格

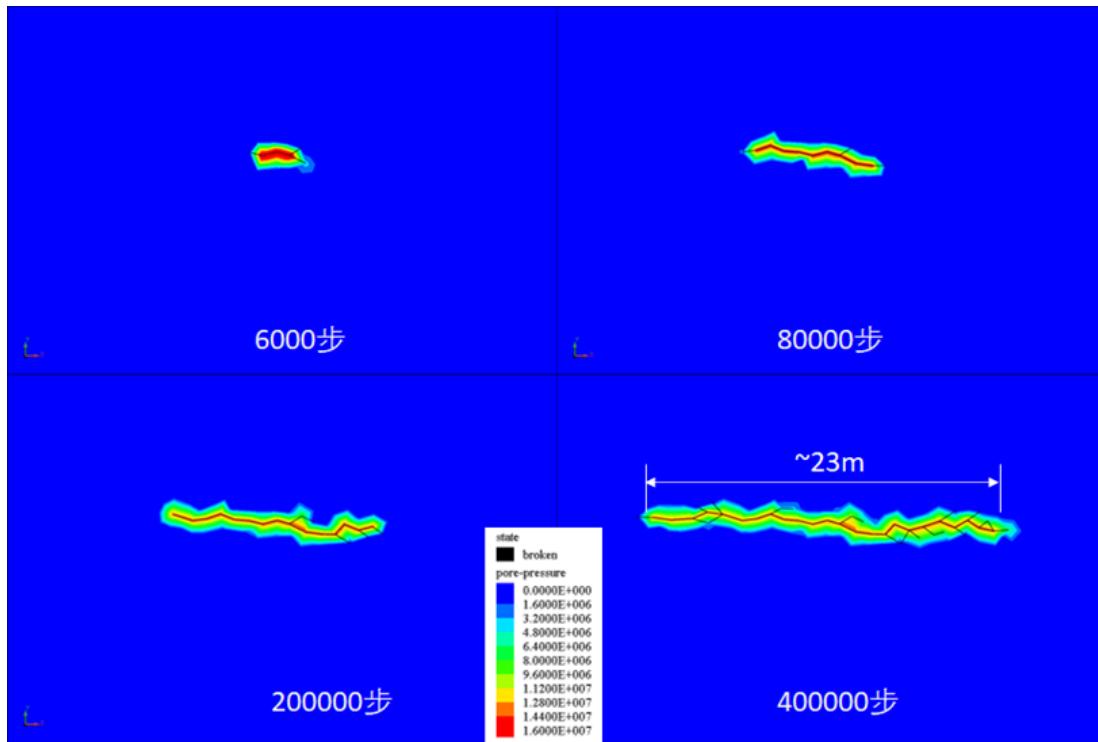


图 67 围岩在流体压力作用下的扩展过程以及张开裂隙中的流体压力分布

7.6 热力学计算

7.6.1 固体单元热传导

有限元固体单元中的热传导遵从傅里叶 Fourier's law, 单元中的热流量 $q_{s_t,i}$ 的计算公式如下:

$$q_{s_t,i} = -k_{s_t,cond,ij} \frac{\partial T_{s_t}}{\partial x_j} \quad (93)$$

其中, $k_{s_t,cond,ij}$ 是固体单元中的热传导率, T_{s_t} 是单元内任一点的温度。在单元节点上, 温度的变化与节点上热量的流入或流出的关系是:

$$\frac{dT_{s_t,l}}{dt} = \frac{\Delta Q_{s_t,cond,l}}{C_{s_t} m_l} \quad (94)$$

其中, $T_{s_t,l}$ 、 $\Delta Q_{s_t,cond,l}$ 和 m_l 分别是节点 l 的温度、热量增量和质量, C_{s_t} 是固体单元的热容量。

假设单元内温度场为常量, 那么可以根据推导单元应变场一样的方法得到温度场计算公式如下:

$$\frac{\partial T_{s_t}}{\partial x_i} = -\frac{1}{\Omega N_{dim}} \sum_{f=0}^{N_{dim}} T_{s_t,f} n_i^{(f)} s^{(f)} \quad (95)$$

假定面上的热流量平均分配到面上节点, 则

$$\Delta Q_{s_t,cond,l} = \frac{1}{N_{dim}} \sum_{f=0, f \neq l}^{N_{dim}} q_{s_t,i} n_i^{(f)} s^{(f)} \quad (96)$$

由于,

$$\sum_{f=0}^{N_{dim}} q_{s,t,i} n_i^{(f)} s^{(f)} = 0 \quad (97)$$

因此,

$$\Delta Q_{s,t,cond,l} = -\frac{1}{N_{dim}} q_{s,t} n_i^{(l)} s^{(l)} = -\frac{1}{N_{dim}} k_{s,t,cond,ij} \left(\frac{1}{\Omega N_{dim}} \sum_{f=0}^{N_{dim}} T_{s,t,f} n_i^{(f)} s^{(f)} \right) n_i^{(l)} s^{(l)} \quad (98)$$

求得 $\Delta Q_{s,t,cond,l}$ 后, 利用显式迭代可以求出 $t + \Delta t$ 时刻的序号为 i 的节点的温度值为:

$$T_{s,t,l,t+\Delta t} = T_{s,t,l,t} + \frac{\Delta Q_{s,t,cond,l}}{C_{s,t}} \Delta t \quad (99)$$

7.6.2 固体单元边界的热对流

如果单元边界和周围环境存在热对流, 假设单元边界面积为 $A_{s,en,\Gamma}$, 环境温度为 T_{en} , 单元边界温度为 $T_{s,en,\Gamma}$, 单元与环境之间的传热系数为 $h_{s,en,conv}$, 那么单位时间环境流入单元的热量为:

$$\Delta Q_{s,en,conv} = h_{s,en,conv} (T_{en} - T_{s,en,\Gamma}) A_{s,en,\Gamma} \quad (100)$$

单元边界节点 l 上由于环境温度热交换产生的热量增量为:

$$\Delta Q_{s,en,conv,l} = \frac{1}{N_{dim}} h_{s,en,conv} (T_{en} - T_{s,en,\Gamma}) A_{s,en,\Gamma} \quad (101)$$

孔隙流体的热传导 (thermal conduction of flow)

热在孔隙流体中的热传导遵从傅里叶 Fourier's law, 与固体中热传导的推导一样, 孔隙流体的节点 l 由于热传导产生的热增量为:

$$\Delta Q_{f,t,cond} = -\frac{1}{N_{dim}} k_{f,cond,ij} \left(\frac{1}{\Omega N_{dim}} \sum_{f=0}^{N_{dim}} T_{f,t,f} n_i^{(f)} s^{(f)} \right) n_i^{(l)} s^{(l)} \quad (102)$$

其中, $k_{f,cond,ij}$ 为孔隙流体的热传导率, $T_{f,t,f}$ 为流节点 f 的温度。

对于 PCDC2D 中的一维孔隙流通道, $N_{dim}=1$, $\Omega=L_f \delta_{ap}$, $k_{f,cond,ij}$ 为常量标量值, $s^{(f)} = \delta_{ap}$ 。其中, L_f 为流通道单元的长度, δ_{ap} 是流通道张开度。

对于 PCDC3D 中的二维孔隙流通道, $N_{dim}=2$, $\Omega=A_f \delta_{ap}$, $k_{f,cond,ij}$ 为二阶张量, $s^{(f)} = l_f^{(f)} \delta_{ap}$ 。其中, A_f 为流通道单元的面积, $l_f^{(f)}$ 是节点 f 对面的三角形边的长度。

孔隙流体的热移流 (thermal advection in flow)

热量会随着孔隙流体的流动而转移, 这种现象称之为热移流。热移流遵守如下偏微分方程:

$$\frac{\partial T_{f,t}}{\partial t} + \nabla \cdot (T_{f,t} \mathbf{V}_f) = 0 \quad (103)$$

其中, $\nabla \cdot$ 表示散度, \mathbf{V}_f 是流体流速矢量。该方程可以用有限体积法进行计算, 将其在以流节点 (比如节点 l) 为中心的给定控制区域 A 上进行积分,

$$\int_A \frac{\partial T_{f,t}}{\partial t} dA + \int_A \nabla \cdot (T_{f,t} \mathbf{V}_f) dA = 0 \quad (104)$$

然后利用高斯散度定理，将等式左边第二项转换到边界上积分

$$\int_A \nabla \cdot (T_{f,t} \mathbf{V}_f) = \oint_{\Gamma} T_{f,t} \mathbf{V}_f \mathbf{n} ds \quad (105)$$

其中， Γ 是区域 A 的边界， \mathbf{n} 是边界 ds 上的单位外法向方向矢量， ds 是该段边界的长度。 $T_{f,t}$ 是边界 ds 上的温度值，虽然 $T_{f,t}$ 是未知量，但积分区域离散后，可以根据上迎风法（upwind），如果边界 ds 上 $\mathbf{V}_f \mathbf{n}$ 的值大于零，则取 $T_{f,t}$ 为在 \mathbf{n} 反向节点，即节点 l 的温度值，否则，取在 \mathbf{n} 正向的节点的温度值。

等式左边第一项可以近似为：

$$\int_A \frac{\partial T_{f,t}}{\partial t} dA = \frac{\Delta Q_{f,t,adv,l}}{C_{f,t} m_{f,l}} A \quad (106)$$

因此，

$$\frac{\Delta Q_{f,t,adv,l}}{C_{f,t} m_{f,l}} A + \oint_{\Gamma} T_{f,t} \mathbf{V}_f \mathbf{n} ds = 0 \quad (107)$$

$$\Delta Q_{f,t,adv,l} = -\rho_f C_{f,t} \oint_{\Gamma} T_{f,t} \mathbf{V}_f \mathbf{n} ds \quad (108)$$

其中， ρ_f 是流体密度， $\Delta Q_{f,t,adv,l}$ 是在流节点 l 处由于热移流产生的热增量。

7.6.3 固体单元与孔隙流体之间的热对流

假定固体有限元单元节点 l 的温度为 $T_{s,t,l}$ ，与之相关的流节点的温度为 $T_{f,t,l}$ ，固体单元与流体的传热系数为 $h_{s,f,conv}$ 。则从流单元 i 流入固体单元节点 l 的热量为

$$\Delta Q_{s,f,conv,l} = \frac{1}{N_{dim}} h_{s,f,conv} L_{f,i} (T_{f,t,l} - T_{s,t,l}) f_f(S_{f,l}) \Delta t \quad (109)$$

其中， $L_{f,i}$ 是流通道的特征尺寸值， $S_{f,l}$ 是与固体单元节点 l 相关的流节点的流体饱和度， $f_f(S_{f,l})$ 的定义见公式(81)。从固体单元节点 l 流入与之相关的流节点的热量为：

$$\Delta Q_{f,s,conv,l} = -\Delta Q_{s,f,conv,l} \quad (110)$$

接触传热（Contact thermal transfer）

固体单元之间的接触传热符合热对流规律，如果固体单元 i 和 j 接触，则单元 i 接触面上的单元节点 l 获得的热量增量近似为：

$$\Delta Q_{s,s,cont,l} = \frac{1}{N_{dim}} h_{s,s,cont} L_{cont,ij} (T_{s,t,j} - T_{s,t,i}) \Delta t \quad (111)$$

其中， $L_{cont,ij}$ 是固体单元 i 和 j 相互接触的接触面的特征尺寸， $h_{s,s,cont}$ 是固体单元的对流换热系数， $T_{s,t,i}$ 和 $T_{s,t,j}$ 分别是固体单元 i 和 j 的温度。固体单元 j 相对应的接触面上的节点 m 相应的热增量为：

$$\Delta Q_{s_s_cont,m} = -\Delta Q_{s_s_cont,l} \quad (112)$$

7.6.4 热-固耦合计算

固体单元中的应力会由于温度的变化而产生热应力，而固体单元的应力变化一方面可能会改变固体的热属性和传热参数，另一方面由于固体的变形和破坏，从连续到非连续体产生的破裂面等，也会改变热量在固体单元中的流动等。PCDC 程序能够通过命令打开热力学和固体力学开关，以及调整每一迭代步的热力学和固体力学计算的步长来模拟热量和固体之间的相互耦合作用。除了模拟上热量在固体中的传导、对流和移流外，通过下列公式计算热应力增量来模拟热量对固体单元应力的影响：

$$\Delta \sigma_{ij} = -\alpha_s K \Delta T_s \quad (113)$$

其中， α_s 和 K 分别为固体单元的热膨胀系数和体积模量； ΔT_s 是固体有限元单元中的温度变化。

7.6.5 热-流-固耦合计算

除了模拟流-固耦合计算，PCDC 还可以通过同时开启热力学、裂隙流体力学和固体力学计算的开关，以及在每一步迭代计算中设置热力学、裂隙流体力学和固体力学计算的时间步长来进行三者之间的耦合计算。

7.6.6 热-固本构模型及输入参数

各向同性热-固本构模型（therm{al}-iso-h{eat}）的输入参数见表 12。表中的是固体单元的热参数，其中，传热系数是固体单元边界与环境之间的传热系数。

表 12 各向同性热-固本构模型（therm{al}-iso-h{eat}）的输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
热传导率	$k_{s_t_cond,ij}$	con{ductivity}	浮点	$W/(m. ^\circ C)$
热容量	C_{s_t}	cap{acity}	浮点	$J/(kg. ^\circ C)$
传热系数	$h_{s_en_conv}$	t{ransfer}-c{oeficient}	浮点	$W/m^2 ^\circ C$
热膨胀系数	α_s	e{xpansion}-c{oeficient}	浮点	$1/ ^\circ C$

7.6.7 热-流本构模型及输入参数

热-流本构模型（t{hermal}-f{luid}）及输入参数如表 13 所示。表中的是流体的热参数，其中，传热系数是固体单元边界-流通道中流体之间的传热系数。

表 13 热-流的本构模型(t{hermal}-f{luid})输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
热传导率	$k_{f_t_cond,ij}$	con{ductivity}	浮点	$W/(m. ^\circ C)$

热容量	C_{f_t}	cap{acity}	浮点	$J/(kg \cdot ^\circ C)$
传热系数	$h_{s_f_conv}$	t{ransfer}-c{oeficient}	浮点	$W/m^2 \cdot ^\circ C$

7.6.8 边界条件

热力学计算的边界条件可以加到单元节点或单元面上。其中，可加到节点上的边界条件有两种：therm{al}-s{olid}-b{oundary}-c{ondition}和therm{al}-f{low}-b{oundary}-c{ondition}，分别见表14和表15。另外也可以在单元面上施加热力学边界条件，比如固体单元边界面的环境温度和与之相关的传热系数，以及在单元面上以一定的热通量加热等，其边界条件输入参数见表16，其中，如果设置了与环境之间的传热系数，则模拟会根据单元温度和环境温度传热，否则，单元边界面是绝热的。

表14 热-固边界条件(therm{al}-s{olid}-b{oundary}-c{ondition})参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
温度	t{emperature}	浮点<table>	°

表15 热-流边界条件(therm{al}-f{low}-b{oundary}-c{ondition})参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
温度	t{emperature}	浮点<table>	°

表16 热力学常热边界条件(therm{al}-c{onst}-h{eat})输入参数表

参数	关键词	数据类型	单位
热通量	h{eat}-f{lux}	浮点	J/s
与环境之间的传热系数	t{ransfer}-c{oeficient}	浮点	$W/m^2 \cdot ^\circ C$
环境温度	e{nvironment}-t{emperature}	浮点	°

7.6.9 算例一：圆环内、外温差下的温度分布和应力响应的模拟

该算例验证热-固耦合模拟的有效性。如图68所示的圆环，内、外半径分别为 r_i 和 r_o ，内、外界面上具有不同的恒定温度。在这种边界条件下，达到稳定温度状态下的沿圆环半径 r 位置分布的温度的解析解为(Eslami et al., 2013)：

$$T(r) = \frac{T_i - T_o}{\ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right)} \ln\left(\frac{r_o}{r}\right) + T_o \quad (114)$$

而 r 点处的径向 $\sigma_r(r)$ 和环向应力 $\sigma_t(r)$ 分别为：

$$\sigma_r(r) = \frac{E\alpha_s(T_i - T_o)}{2(1-\nu)\ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right)} \left[\ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right) + \frac{r_i^2}{r_o^2 - r_i^2} \left(1 - \frac{r_i^2}{r^2}\right) \ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right) \right] \quad (115)$$

$$\sigma_t(r) = \frac{E\alpha_s(T_i - T_o)}{2(1-\nu)\ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right)} \left[1 - \ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right) + \frac{r_i^2}{r_o^2 - r_i^2} \left(1 + \frac{r_i^2}{r^2} \right) \ln\left(\frac{r_o}{r_i}\right) \right] \quad (116)$$

其中, E 、 ν 和 α_s 分别为圆环材料的弹性模量、泊松比以及线性热膨胀系数。

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\thermal\ConductionInHollowDisc\”, 找到并打开工程文件“ConductionInHollowDisc_2d.prj”, 运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“ConductionInHollowDisc_2d.sc”。计算结果参见图 69 的温度分布云图、半径 r 位置模拟得到的温度和应力与解析值的对比。对比显示, 模拟得到的温度分布、径向和环向应力值与解析值吻合良好。

需要注意的是, 本算例中的节理被赋予了相当大的抗拉强度、粘结力、摩擦角和断裂能, 以保证模拟中无裂纹产生和扩展。

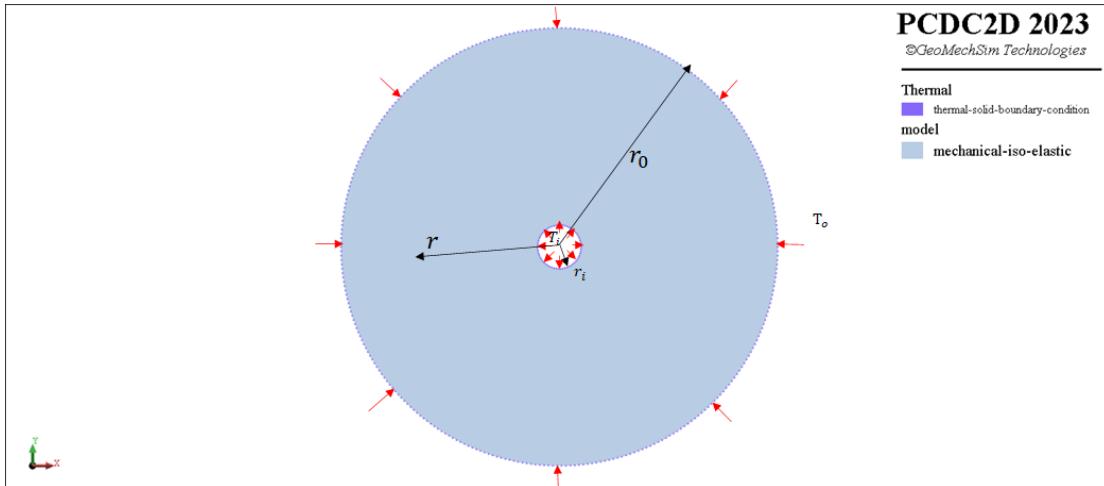


图 68 圆环温度及应力响应模型

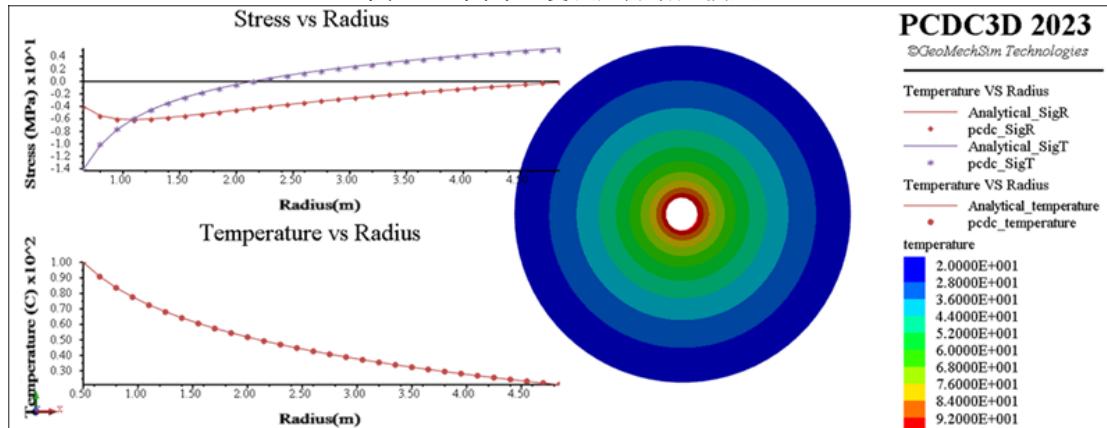


图 69 圆环温度分布云图以及圆环中温度和应力的模拟值与解析值对比

7.6.10 算例二：热-固耦合计算模拟

该算例的模型与 7.6.9 中的算例一样, 但边界条件中的内、外界面处的温度值不同。同时, 圆环的节理单元力学参数也不一样, 其抗拉强度、粘结力、摩擦角和断裂能均取较小的值, 在计算过程中可以模拟到圆环中裂纹的产生和扩展过程。

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\thermal\ThermalMechanicalCoupling\”, 找到并打开工程文件

“ThermalMechanicalCoupling_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“ThermalMechanicalCoupling_2d.sc”。模拟得到的不同计算步数时的温度分布云图以及裂纹扩展状态参见图 70。

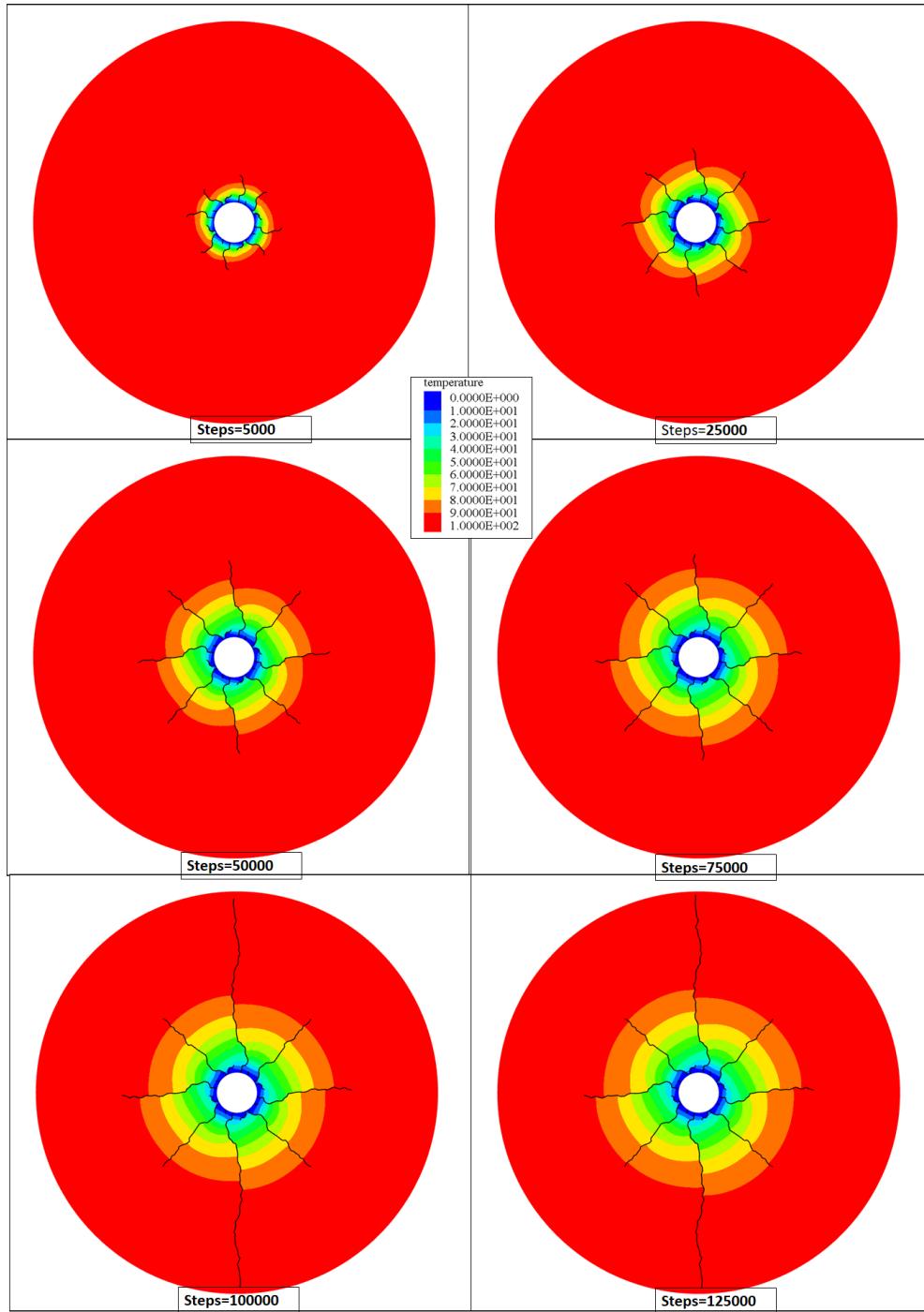


图 70 不同计算步数时的温度分布云图以及裂纹扩展状态

7.6.11 算例三：热-流耦合计算模拟

该算例用来验证热-流耦合计算的有效性。模型几何形状如图 71 所示，矩形试样中间线 ab 假设为

张开的长裂隙，裂隙 a、b 两点分别施加流体压力 p_a 和 p_b ，在压力作用下，裂隙中流体达到流速为 v_f 的动态平衡。然后，初始化试样中和流通道流体的温度到 T_i ，在 a 点的流节点设置温度为 T_a 的边界条件。假设流体的密度、运动粘度系数、热容量和热传导系数分别为 ρ_f 、 μ_{f_k} 、 C_{f_t} 和 $k_{f_t_cond}$ ；固体试样的密度、运动粘度系数、热容量和热传导系数分别为 ρ_s 、 μ_{f_s} 、 C_{s_t} 和 $k_{s_t_cond}$ 。在这样的边界条件和材料参数情况下，流通道中 x 点的流体的温度随时间 t 的解析解为（Lauwerier, 1955）：

$$T_f(x, t) = T_i + (T_a - T_i) \operatorname{erfc} \left[\frac{k_{s_t_cond}}{\rho_f C_{f_t} v_f \delta_i} \sqrt{\frac{\rho_s C_{s_t} v_f}{k_{s_t_cond} (v_f t + x)}} \right] \quad (117)$$

距离流通道 y 处沿 cd 线 x 点处的固体试样中的温度随时间 t 的解析值为：

$$T_s(x, y, t) = T_i + (T_a - T_i) \operatorname{erfc} \left[\frac{2k_{s_t_cond}x + |y|\rho_f C_{f_t} v_f \delta_i}{2\rho_f C_{f_t} v_f \delta_i} \sqrt{\frac{\rho_s C_{s_t} v_f}{k_{s_t_cond} (v_f t + x)}} \right] \quad (118)$$

在程序主菜单【File】-【Open Project】中浏览到安装目录下的文件夹“Examples\2D\thermal\ConvectiveTransferBetweenFluidSolid”，找到并打开工程文件“ConvectiveTransferBetweenFluidSolid_2d.prj”，运行脚本编辑器窗口中的脚本文件“ConvectiveTransferBetweenFluidSolid_2d.sc”。模拟得到的不同计算时间沿 ab 线和 cd 线的温度值。其中，Tf_50_analytic 和 Tf_150_analytic 分别是在 50 天和 150 天时沿 ab 流通道的流体温度的解析值，而 Tf_50_modelled 和 Tf_150_modelled 是对应的模拟值；Ts_50_analytic 和 Ts_150_analytic 分别是在 50 天和 150 天时沿 cd 线的试样内温度的解析值，而 Ts_50_modelled 和 Ts_150_modelled 是对应的模拟值。对比表明，数值计算得到的值与解析解得到的值吻合良好。

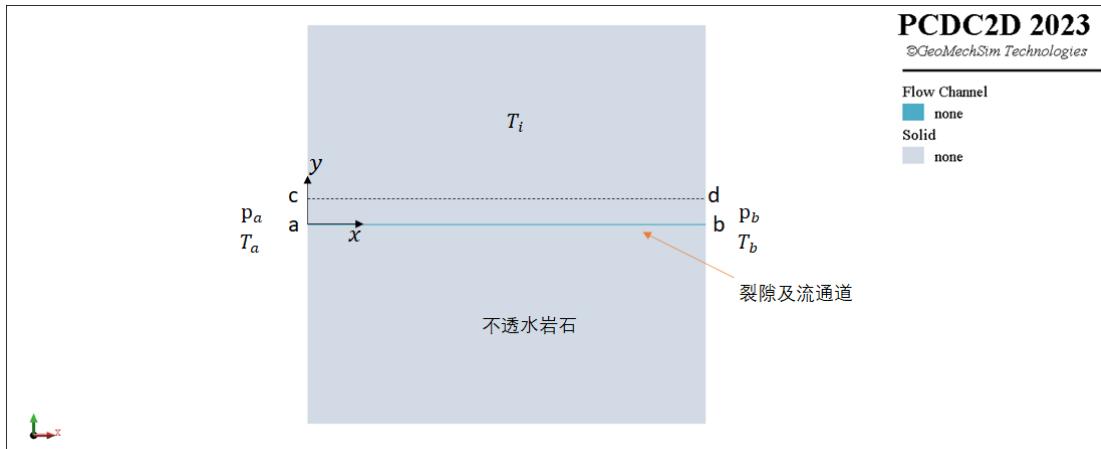


图 71 热-流验证模型的几何形状和边界条件

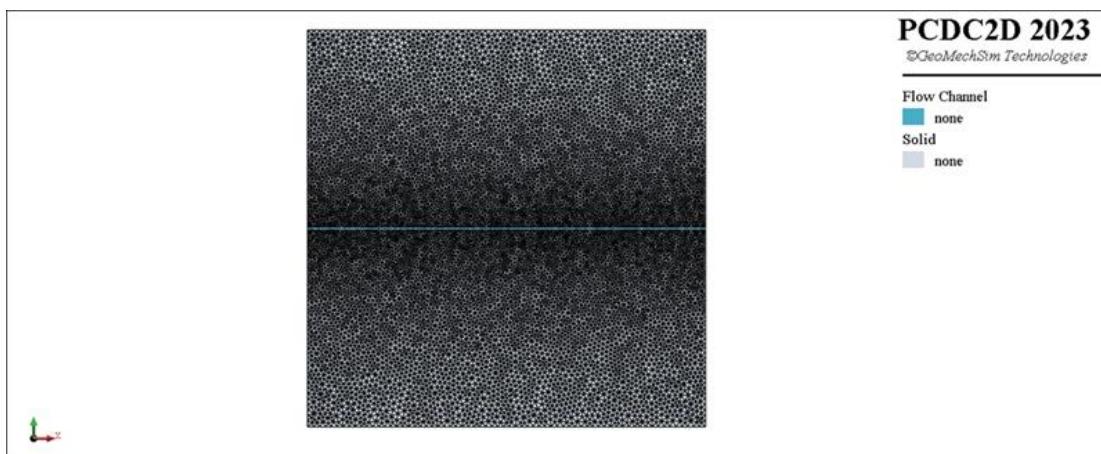


图 72 模型剖分的有限元网格

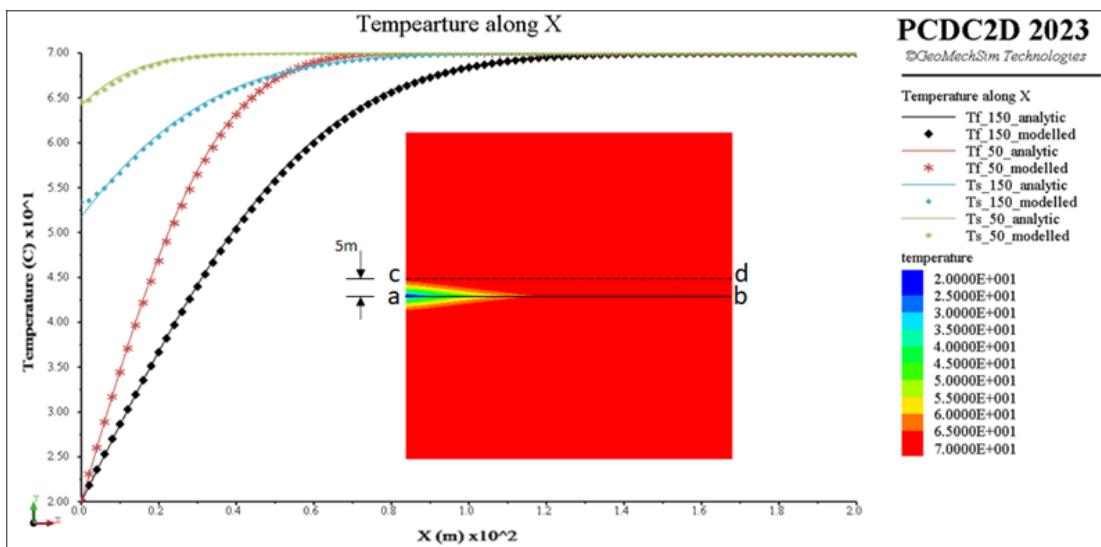


图 73 热-固耦合计算的温度云图和沿 ab 流通道中流体的温度以及高于 ab 线 5 米处试样沿 cd 线的温度在不同时间的模拟值与解析值对比（其中， $Tf_{50_analytic}$ 和 $Tf_{150_analytic}$ 分别是在 50 天和 150 天时沿 ab 流通道的流体温度的解析值，而 $Tf_{50_modelled}$ 和 $Tf_{150_modelled}$ 是对应的模拟值； $Ts_{50_analytic}$ 和 $Ts_{150_analytic}$ 分别是在 50 天和 150 天时沿 cd 线的试样内温度的解析值，而 $Ts_{50_modelled}$ 和 $Ts_{150_modelled}$ 是对应的模拟值）

7.7 支撑剂运移计算

水力压裂是一种用于石油和天然气行业的技术，用于提高产量。压裂处理通常涉及将支撑剂作为悬浮液注入基液（压裂液）中。注入结束后，裂缝会闭合在支撑剂上，形成一个导流通道，以便让油气流动。在裂缝中支撑剂的运输和放置通常通过将支撑剂和基液表示为混合物（支撑剂浆液）进行模拟。数值模拟中，假设支撑剂颗粒与裂缝开口相比较小，并且混合物中支撑剂的数量由其体积浓度给出。数值计算考虑了流体-支撑剂-力学耦合，并能模拟计算：

- 堆积形成：当浓度达到一定值时，支撑剂形成堆积，只留下压裂液流动；
- 桥接：当裂缝宽度相对于颗粒尺寸很小时，支撑剂不再被输送；
- 支撑剂对流：当密度梯度导致携带支撑剂的流体运动；

- 支撑剂沉降：当重力作用在支撑剂颗粒上超过粘性阻力时，支撑剂发生沉降。

在模拟中做了如下假设：

- 裂隙内支撑剂的输送和分布在没有重力引起的沉降情况下，支撑剂和流体以相同速度移动 (Adachi, 2007)；
- 假设支撑剂颗粒通常相对于裂隙宽度较小，并且裂隙中的支撑剂数量由其体积分数给出；
- 支撑剂与携带流体之间相对速度的机制是重力引起的沉降。

当支撑剂的体积分数达到饱和值时，浆液（基液和支撑剂的混合物）的行为类似于多孔固体，并且支撑剂颗粒适应形成一个“堆积”。此外，如果接缝开度相对于颗粒直径变小，支撑剂的流动性将受到抑制，再次形成一个“堆积”或“桥梁”。然后，考虑两种效应：首先，支撑剂堆积能够承受闭合裂隙的负荷（力学效应），其次，只有流体能够通过堆积的孔隙移动（流体运输效应）。当允许沉降发生时，支撑剂速度朝重力方向作用，以考虑颗粒沉降。沉降速率与给定尺寸颗粒在给定粘度流体中的 Stoke 速度（在重力作用下）成正比。此外，还将经验乘法因子（体积分数的函数）应用于 Stoke 速度，以考虑颗粒相互作用和壁效应。

7.7.1 支撑剂运移计算

以支撑剂的体积浓度 C_p （支撑剂的体积与浆液体积的比率）为变量的支撑剂运移方程为：

$$\frac{\partial(C_p \delta_{ap})}{\partial t} + \nabla \cdot (C_p \delta_{ap} \mathbf{V}_p) = 0 \quad (119)$$

其中， δ_{ap} 是节理水力张开度， \mathbf{V}_p 是支撑剂的速度矢量，由浆液速度 \mathbf{V}_{slu} 和滑移速度 \mathbf{V}_{sli} 表示为：

$$\mathbf{V}_p = \mathbf{V}_{slu} + (1 - C_p) \mathbf{V}_{sli} \quad (120)$$

浆液速度 \mathbf{V}_{slu} 由浆液的体积流量 \mathbf{q}_{slu} 和裂隙水力张开度确定：

$$\mathbf{V}_{slu} = \frac{\mathbf{q}_{slu}}{\delta_{ap}} \quad (121)$$

而其中的 \mathbf{q}_{slu} 则由裂隙流体方程计算得到，因此支撑剂运移的计算和裂隙流体计算耦合进行的。滑移速度 \mathbf{V}_{sli} 是与重力加速度 \mathbf{g} 平行的矢量，滑移速度的大小由 Stokes 方程计算，而校正因子（与浓度相关的函数）则用于考虑支撑剂相互作用和壁效应的影响：

$$\mathbf{V}_{sli} = f_{sli}(C_p) \mathbf{V}_{stokes} \quad (122)$$

\mathbf{V}_{stokes} 由单个颗粒上的 Stokes 阻力定律确定：

$$\mathbf{V}_{stokes} = (\rho_p - \rho_f) \frac{d_p^2}{18 \mu_{f,d}} \mathbf{g} \quad (123)$$

其中， ρ_p 和 ρ_f 分别是支撑剂颗粒的密度与基液的密度， d_p 是支撑剂的平均直径， $\mu_{f,d}$ 是流体的动力粘性系数。公式(123)中的校正因子 $f_{sli}(C_p)$ 由下列公式确定 (Richardson & Zaki, 1954)：

$$f_{sli}(C_p) = (1 - C_p)^{4.65}$$

公式(119)利用有限体积法计算，如图 73 所示，首先给定以任意流节点 1 为中心的封闭的控制区域 A_p 及其边界 Γ_p ，对该公式在区域 A_p 内积分：

$$\int_{A_p} \frac{\partial(C_p \delta_{ap})}{\partial t} dA + \int_{A_p} \nabla \cdot (C_p \delta_{ap} \mathbf{V}_p) dA = 0 \quad (124)$$

左边第一项 $C_p \delta_{ap}$ 可以近似用节点 l 处的值，则该项可以近似为：

$$\int_{A_p} \frac{\partial(C_p \delta_{ap})}{\partial t} dA = \frac{C_{p,l,t+\Delta t} \delta_{ap,l,t+\Delta t} - C_{p,l,t} \delta_{ap,l,t}}{\Delta t} A_{p,l} \quad (125)$$

其中， $C_{p,l,t+\Delta t}$ 和 $\delta_{ap,l,t+\Delta t}$ 分别为节点 l 当前计算时间的支撑剂浓度和水力张开度，而 $C_{p,l,t}$ 和 $\delta_{ap,l,t}$ 分别为节点 l 上一步计算时间的支撑剂浓度和水力张开度； $A_{p,l}$ 是节点 l 为中心的封闭的控制区域 A_p 的长度（PCDC2D）或面积（PCDC3D）。

利用高斯散度定理将方程(125)左边第二项转化为边界上的积分，并且将(120)、(121)和(122)代入该方程得到：

$$\int_{A_p} \nabla \cdot (C_p \delta_{ap} \mathbf{V}_p) dA = \oint_{\Gamma_p} (C_p \mathbf{q}_{slu}) ds + \oint_{\Gamma_p} (C_p \delta_{ap}) ((1 - C_p)^{5.65} \mathbf{V}_{stokes}) dA \quad (126)$$

由于，

$$\int_{\Gamma_p} (C_p \mathbf{q}_{slu}) ds = \sum_{n=0}^m C_p (\mathbf{q}_{slu} \mathbf{n}) ds \quad (127)$$

其中， m 是总边界数， \mathbf{n} 和 ds 分别为任意边界的单位外法向方向矢量及特征长度。PCDC2D 中， $ds=1$ ；PCDC3D 中， ds 等于边界某线段长度。

公式(126)等式右边第二项在离散边界上的积分为：

$$\oint_{\Gamma_p} (C_p \delta_{ap}) ((1 - C_p)^{5.65} \mathbf{V}_{stokes}) dA = \sum_{n=0}^m (C_p \delta_{ap}) ((1 - \bar{C}_p)^{5.65} \mathbf{V}_{stokes} \mathbf{n}) ds \quad (128)$$

其中， \bar{C}_p 为边界上任意边界段所在流通道单元的所有节点的支撑剂浓度的平均值。根据公式(124)~(128)得到求解节点 l 的支撑剂浓度的显式动力学方程为：

$$C_{p,l,t+\Delta t} \delta_{ap,l,t+\Delta t} = C_{p,l,t} \delta_{ap,l,t} - \frac{H_p \Delta t}{A_{p,l}} \quad (129)$$

$$H_p = \sum_{n=0}^m C_p (\mathbf{q}_{slu} \mathbf{n}) ds + \sum_{n=0}^m (C_p \delta_{ap}) ((1 - \bar{C}_p)^{5.65} \mathbf{V}_{stokes} \mathbf{n}) ds \quad (130)$$

在(130)式中，根据有限体积法中上迎风原则，等式右边第一项中的 C_p 确定为：

$$C_p = \begin{cases} C_{p,l} & \text{if } \mathbf{q}_{slu} \mathbf{n} > 0 \\ C_{p,m} & \text{if } \mathbf{q}_{slu} \mathbf{n} < 0 \end{cases} \quad (131)$$

等式右边第二项中的 $C_p \delta_{ap}$ 确定为：

$$C_p \delta_{ap} = \begin{cases} C_{p,l} \delta_{ap,l} & \text{if } \mathbf{V}_{stokes} \mathbf{n} > 0 \\ C_{p,m} \delta_{ap,m} & \text{if } \mathbf{V}_{stokes} \mathbf{n} < 0 \end{cases} \quad (132)$$

其中, $C_{p,l}$ 和 $\delta_{ap,l}$ 是上迎风节点 l 的值, 而 $C_{p,m}$ 和 $\delta_{ap,m}$ 是下迎风节点 m 的值。

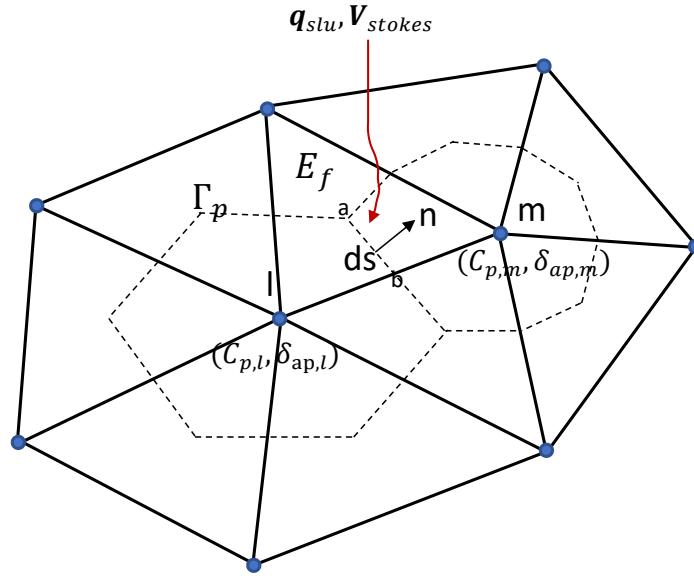


图 74 PCDC3D 中用于计算支撑剂运移的有限体积法中的以流节点 I 为中心控制区域的划分示意图（虚线 Γ_p 为节点 I 的控制区域的边界, 由流通道三角形的中心和边的中点组成）

7.7.2 支撑剂-流体-固体耦合计算

支撑剂浆液的流动可以用裂隙流体的流动方程描述, 其 1 个单元宽度的体积流量 q_{slu} 可以用公式 (80) 计算, 其中流体的密度等于支撑剂浆液的密度 ρ_{slu} 。支撑剂的浓度变化会导致浆液密度的变化, 从而引起 q_{slu} 的变化, 这需要支撑剂-流体的耦合计算。根据 Boussinesq 近似, 可假设浆液密度与支撑剂的浓度具有下列线性关系:

$$\rho_{slu} = \rho_f \left[1 + C_p \left(\frac{\rho_p}{\rho_f} - 1 \right) \right] \quad (133)$$

其中, ρ_f 为基液的密度。

支撑剂颗粒对浆液浓度的运动粘结力会有一定的影响, 可利用下列经验公式计算浆液的动力粘结系数 μ_{slu_d} :

$$\mu_{slu_d} = \mu_{f_d} \left(1 - \frac{C_p}{C_{p_s}} \right)^\beta \quad (134)$$

其中, μ_{f_d} 是基液的动力粘度系数; β 是 -3 到 -1 的系数; C_{p_s} 是支撑剂的饱和浓度, 定义为:

$$C_{p_s} = \frac{\rho_{pack}}{\rho_p} \quad (135)$$

这里, ρ_{pack} 代表填充支撑剂的最大密度。基液的动力粘度系数 μ_{f_d} 与运动粘度系数 μ_{f_static} 的关系是:

$$\mu_{f_d} = \mu_{f_static} \rho_{slu} \quad (136)$$

当支撑剂的浓度达到饱和值 C_{p_s} 时，支撑剂承载负荷的条件得以满足，对于有侧向压力的材料，承载的应力增量的一般方程如下：

$$\Delta\sigma_p = -\frac{\delta_{p_s} - \delta_{ap}}{\delta_{p_s}} E_p \quad (137)$$

其中， $\Delta\sigma_p$ 是支撑剂浓度达到饱和后，由于节理的变形引起的支撑剂的反向应力增量； δ_{p_s} 是支撑剂达到饱和状态时的节理张开度； E_p 是支撑剂饱和状态下的变形模量。当支撑剂的浓度未达到饱和值时， $\Delta\sigma_p = 0$ 。将得到的 $\Delta\sigma_p$ 与浆液在同一节点上的流体压应力相加，即为该节点由支撑剂迁移与裂隙流体引起的总的压应力。

如果在流节点形成了支撑剂颗粒填充层，那么与该流节点相连的流道中的颗粒输送将被禁用。然而，流体仍然可以通过填充的流节点进行流动，但在方程中使用的水力张开度的数值可能需要用户自定义的支撑剂张开度因子 $f_{p,\delta}$ 折减。

另外，如果流道的水力张开度小于给定的阀值，虽然基液仍然可以通过流道，但支撑剂颗粒在该流道中停止迁移。该张开度阀值与支撑剂颗粒直径有关，由定义的支撑剂颗粒的颗粒因子 $f_{p,d}$ 折减确定。

7.7.3 支撑剂-流-固耦合本构模型及输入参数

各向同性的支撑剂-流体-固体耦合模型"hydr{aulic}-p{orous}-p{roppant}-m{edium}"的输入参数如表 17 所示。当有限元单元被赋予该本构模型后，该单元自动成为流通道单元，可以进行裂隙流体和支撑剂迁移、以及流-固和支撑剂-流-固耦合计算。

表 17 支撑剂-流体-固体耦合模型"hydr{aulic}-p{orous}-p{roppant}-m{edium}"的输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
基液密度	ρ_f	f{luid}-den{sity}	浮点	m ³ /kg
基液体积模量	K_f	f{luid}-b{ulk}	浮点	Pa
基液运动粘度系数	μ_{f_static}	vis{cosity}	浮点	m ² /s
初始水力张开度	δ_{ap}^0	a{perature}-i{nitial}	浮点	m
最小水力张开度	δ_{ap}^{min}	a{perature}-min{imum}	浮点	m
最大水力张开度	δ_{ap}^{max}	a{perature}-max{imum}	浮点	m
是否计算基液损失		leak-off	布尔	-
基质孔隙水压力	p_s	m{atrix}-p{ore}-p{ressure}	浮点	Pa
基质渗透系数	k_s	m{atrix}-p{ermeability}	浮点	m ²
基质孔隙压缩系数	$C_{s,p}$	m{atrix}-p{orosity}-c{ompressibility}	浮点	1/Pa

基质孔隙率	$n_{s,p}$	$m\{atrix\}-p\{orosity\}$	浮点	-
支撑剂密度	ρ_p	$p\{roppant\}-den\{sity\}$	浮点	m^3/kg
支撑剂颗粒直径	d_p	$p\{roppant\}-s\{ize\}$	浮点	m
支撑剂颗粒因子	$f_{p,d}$	$p\{roppant\}-s\{ize\}-f\{actor\}$	浮点	-
张开度因子	$f_{p,\delta}$	$a\{perature\}-f\{actor\}$	浮点	-
支撑剂饱和浓度	$C_{p,s}$	$p\{roppant\}-c\{oncentration\}-l\{imit\}$	浮点	-
支撑剂变形模量	E_p	$p\{roppant\}-m\{odulus\}$	浮点	Pa
浆液粘性指数	β	$vis\{cosity\}-p\{ower\}$	浮点	-

7.7.4 计算边界条件

和裂隙流体的输入边界条件一样，支撑剂运移及其与流体和固体的耦合计算边界条件也仅适用于节点。边界条件“`hydra{ulic}-p{roppant}-b{oundary}`”的输入参数见表 18。当有限元单元节点被赋予该边界条件后，该节点自动成为流节点。同时，可以在该节点上施加裂隙流体的边界条件。

表 18 边界条件“`hydra{ulic}-p{roppant}-b{oundary}`”的输入参数列表

参数	关键词	数据类型	单位
支撑剂浓度	$p\{roppant\}-v\{olumetric\}-c\{oncentration\}$	浮点	-
支撑剂体积流量	$p\{roppant\}-v\{olumetric\}-f\{low\}-r\{ate\}$	浮点	m^3/s

7.7.5 算例

7.8 土壤的水分迁移计算（underway）

在干燥过程中，土壤中的水分迁移非常复杂。为简化起见，假设水分迁移与土壤中含水量的梯度成正比。沿着 i 方向，单位面积水的质量流量可以写成

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_j} = \frac{1}{A} \iint_s \frac{\partial F_i}{\partial x_j} dA$$

$$\iint_s \frac{\partial F_i}{\partial x_j} dA = \oint_c F_i \cdot n_j ds$$

$$\oint_c F_i \cdot n_j ds = \sum_{f=1}^3 \bar{F}_i^{(f)} \cdot n_j^{(f)} \cdot s^{(f)}$$

$$\bar{F}_i^{(f)} = \frac{1}{2} \sum_{l=1, l \neq f}^3 F_i^l$$

$$\oint_c F_i \cdot n_j ds = \sum_{f=1}^3 \bar{F}_i^{(f)} \cdot n_j^{(f)} \cdot s^{(f)} = \sum_{f=1}^3 \left(\frac{1}{2} \sum_{l=1, l \neq f}^3 F_i^{(l)} \right) \cdot n_j^{(f)} \cdot s^{(f)} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^3 F_i^{(l)} \left(\sum_{f=1, f \neq l}^3 n_j^{(f)} \cdot s^{(f)} \right)$$

$$\sum_{f=1}^3 n_j^{(f)} \cdot s^{(f)} = 0$$

$$\sum_{f=1, f \neq l}^3 n_j^{(f)} \cdot s^{(f)} = -n_j^{(l)} \cdot s^{(l)}$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{2A} \sum_{l=1}^3 F_i^{(l)} \cdot n_j^{(l)} \cdot s^{(l)}$$

7.9 支护计算

PCDC2D/3D 可以模拟岩体工程中常用的支护材料-锚杆在支护过程中的理想弹塑性力学响应。如图 75 所示，被模拟的锚杆被自动离散成多个具有质量集中在节点上的两节点（bolt nod）多的一维锚杆单元（bolt element）。锚杆的模拟主要假设如下：

- 假设锚杆是细长的，忽略锚杆抗剪切和抗弯曲作用；
- 在垂直于锚杆轴向的方向上，忽略了灌浆的正向刚度；
- 沿锚杆轴向方向，锚杆节点与包含该锚杆节点的有限元单元的相对位移使锚杆与围岩之间产生剪切力。

模拟中，首先根据锚杆的弹塑性本构关系计算锚杆单元的轴向力，然后根据锚杆节点与所在有限元单元的相对位移计算锚杆与围岩之间的剪切力。最后将求得的轴向力与剪切力分解到锚杆节点上，通过锚杆节点上的显式动力学方程求解产生的位移增量，进而更新锚杆节点位置坐标。

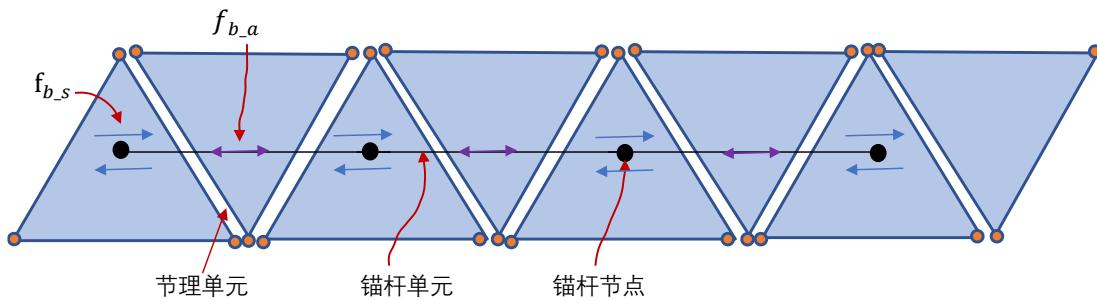


图 75 一维锚杆单元 ($f_{b,s}$ 是锚杆节点与所在的有限元单元的相对位移产生的沿锚杆轴向方向的剪切力； $f_{b,a}$ 是锚杆单元由于长度变化产生的轴向力)

7.9.1 锚杆轴向力计算

计算弹塑性锚杆单元在时间步长 Δt 的轴向力增量 Δf_b 分两步进行：

- 先利用下列公式试算得到在弹性线性本构关系下的轴向力增量：

$$f_{b_a,t+\Delta t}^* - f_{b_a,t} = \frac{E_b A_b}{L_{b_i}} \Delta u_{b_a,t} \quad (138)$$

因此，

$$f_{b,t+\Delta t}^* = f_{b,t} + \frac{E_b A_b}{L_{b_i}} \Delta u_{b,t} \quad (139)$$

其中， $f_{b_a,t+\Delta t}^*$ 是本次时间 $t + \Delta t$ 迭代步试算得到的轴向力， $f_{b_a,t}$ 和 $\Delta u_{b_a,t}$ 分别是上次迭代步得的轴向力和轴向位移增量。 L_{b_i} 是锚杆单元的初始长度，而 E_b 和 A_b 分别是锚杆单元的弹性杨氏模量和横截面积， $A_b = \pi D_b^2 / 4$ ，其中， d_b 是锚杆单元的直径；

- 然后根据给定的锚杆的拉伸屈服强度 $f_{b_t_l}$ 和抗压强度 $f_{b_c_l}$ 校正试算得到的轴向力，从而得到作用在锚杆单元的轴向力 $f_{b_a,t+\Delta t}$ ，

$\Delta u_{b_a,t} \geq 0$ 的情况下，

$$f_{b_a,t+\Delta t} = \begin{cases} f_{b_a,t+\Delta t}^* & \text{if } f_{b_t_l} \geq f_{b_a,t+\Delta t}^* \\ f_{b_t_l} & \text{if } f_{b_t_l} < f_{b_a,t+\Delta t}^* \end{cases} \quad (140)$$

$\Delta u_{b_a,t} < 0$ 的情况下，

$$f_{b_a,t+\Delta t} = \begin{cases} f_{b_a,t+\Delta t}^* & \text{if } f_{b_c_l} \leq f_{b_a,t+\Delta t}^* \\ f_{b_t_l} & \text{if } f_{b_c_l} > f_{b_a,t+\Delta t}^* \end{cases} \quad (141)$$

卸载情况下，锚杆单元的变形与轴向力符合线性弹性关系。另外，如果单元的应变超过给定的锚杆的张拉极限应变 $\varepsilon_{b_t_l}$ 时，则表示锚杆单元发生破坏，即

$$f_{b_a,t+\Delta t} = 0 \quad \text{if } \frac{u_{b_a,t}}{L_{b_i}} \geq \varepsilon_{b_t_l} \quad (142)$$

其中， $u_{b_a,t}$ 是上次迭代得到锚杆单元的拉伸长度（位移值）。

7.9.2 锚杆剪切力计算

只考虑嵌在有限元单元的锚杆节点在沿锚杆单元轴向方向的剪切力计算，并采用沿轴向方向的一维理想弹塑性本构关系。分两步进行计算：

- 根据弹性线性关系，得到灌浆产生对锚杆单元的剪切力为：

$$f_{b_s,t+\Delta t}^* = f_{b_s,t} + K_{b_r,s} \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} \Delta u_{b_s,t} \quad (143)$$

其中， $f_{b_s,t+\Delta t}^*$ 是本次时间 $t + \Delta t$ 迭代步试算得到的剪切力， $f_{b_s,t}$ 和 $\Delta u_{b_s,t}$ 分别是上次迭代步得的剪切力和剪切位移增量； $K_{b_r,s}$ 是围岩与锚杆之间的单位长度的剪切刚度； L_{b0} 和 L_{b1} 分别为与计算锚杆节点相连的两个锚杆单元的长度。锚杆节点的剪切位移增量 $\Delta u_{b_s,t}$ 可以通过该节点与所在有限元单元的节点的相对位移计算得到。

- 根据塑性屈服准则，需要满足锚杆单元的最大剪切力不能超过锚杆与围岩界面的单位长度的剪切强度 S_b 。

$\Delta u_{b_s,t} \geq 0$ 的情况下,

$$f_{b_s,t+\Delta t} = \begin{cases} f_{b_s,t+\Delta t}^* & \text{if } f_{b_s,t+\Delta t}^* \leq S_b \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} \\ S_b \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} & \text{if } f_{b_s,t+\Delta t}^* > S_b \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} \end{cases} \quad (144)$$

$\Delta u_{b_s,t} < 0$ 的情况下

$$f_{b_s,t+\Delta t} = \begin{cases} f_{b_s,t+\Delta t}^* & \text{if } f_{b_s,t+\Delta t}^* > -S_b \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} \\ -S_b \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} & \text{if } f_{b_s,t+\Delta t}^* \leq -S_b \frac{L_{b0} + L_{b1}}{2.0} \end{cases} \quad (145)$$

由于剪切破坏可能发生在围岩与灌浆之间或灌浆与锚杆之间的界面，取决于哪个界面是最脆弱的。因此， S_b 的值由围岩与灌浆之间界面的剪切强度 S_{r_g} 和灌浆与锚杆之间界面的剪切强度 S_{b_g} 中最小的值给出。 S_{r_g} 和 S_{b_g} 用下列公式计算:

$$S_{r_g} = \pi(D_b + 2T_g)(C_{r_g} + \sigma_{b_n} \tan \phi_{r_g}) \quad (146)$$

$$S_{b_g} = \pi D_b(C_{b_g} + \sigma_{b_n} \tan \phi_{b_g}) \quad (147)$$

其中， T_g 是灌浆厚度； C_{r_g} 和 $\tan \phi_{r_g}$ 是围岩和灌浆界面之间的粘结力和摩擦角； C_{b_g} 和 $\tan \phi_{b_g}$ 是锚杆和灌浆界面之间的粘结力和摩擦角。 σ_{b_n} 是垂直锚杆轴向的法向应力，根据锚杆节点所在有限元单元的应力以及垂直于锚杆单元的法向方向计算得到。如果 $\sigma_{b_n} > 0$ ，为拉应力，则在公式(146)和(147)中取 $\sigma_{b_n} = 0.0$ 。

计算得到的剪切力的反力作用在有限元单元上，因此其反力需要分解到有限元单元的节点上。得到锚杆节点上的合力后，就可以利用节点显式动力学方程求解得到节点的加速度、速度和位移，进而更新锚杆节点的位置坐标。

锚杆节点动力学计算中的阻尼力 F_{damp} 定义为:

$$F_{damp,i} = D_{b_f} C_{damp} \dot{u}_i \quad (148)$$

其中， \dot{u}_i 是锚杆节点的速度矢量； D_{b_f} 是锚杆的阻尼因子；而 $C_{damp} = 2L_b \sqrt{E_b \rho_b}$ 。

7.9.3 锚杆弹塑性本构模型

锚杆单元的弹塑性本构模型“mech{anical}-{e}lastic-plastic”的输入参数如表 19 所示

表 19 锚杆单元的弹塑性本构模型“mech{anical}-{e}lastic-plastic”的输入参数表

参数	符号	关键词	数据类型	单位
锚杆的密度	ρ_b	den{sity}	浮点	m^3/kg
锚杆的弹性模量	E_b	y{oung}	浮点	Pa
锚杆的直径	D_b	d{iameter}	浮点	m
锚杆的拉伸屈服强度	$f_{b_t_l}$	t{ensile}-y{ield-f{orce}}	浮点	N

锚杆的抗压强度	$f_{b_c_l}$	c{ompressive}-y{ield}-f{orce}	浮点	N
锚杆的张拉极限应变	$\varepsilon_{b_t_l}$	t{ension}-f{ailure}-s{train}	浮点	-
围岩与锚杆之间的单位长度的剪切刚度	$K_{b_r_s}$	s{hear}-s{tiffness}-r{ock}-b{oilt}	浮点	$\frac{N}{m}/m$
灌浆厚度	T_g	g{rout}-t{hickness}	浮点	m
围岩与灌浆之间的粘结力	C_{r_g}	c{ohesion}-r{ock}-g{rout}	浮点	Pa
灌浆与锚杆之间的粘结力	C_{b_g}	c{ohesion}-g{rout}-b{oilt}	浮点	Pa
围岩与灌浆之间的摩擦角	ϕ_{r_g}	f{riction}-r{ock}-g{rout}	浮点	degree
注浆与锚杆之间的摩擦角	ϕ_{b_g}	f{riction}-g{rout}-b{oilt}	浮点	degree
锚杆的间距	S_b	spac{ing}	浮点	m
锚杆的预应力	f_{b_pre}	pre{tension}-f{orce}	浮点	N
阻尼因子	D_{b_f}	d{amp}-f{actor}	浮点	-

7.9.4 边界条件

锚杆支护的边界条件主要包括力、速度和加速度等，均施加于锚杆的节点（bolt-node）上。

表 20 是速度及速度边界条件输入参数表。在表中，(3D)表示该参数在 PCDC3D 中输入，PCDC2D 没有该项参数的输入；浮点

表 21 是施加于锚杆节点的力的边界条件输入参数表。

表 20 锚杆节点的速度及加速度边界条件 (b{oilt}-n{ode}-c{onstrain}) 参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
沿 X 方向的速度	v{elocity}-x	浮点 <table></table>	m/s
沿 Y 方向的速度	v{elocity}-y	浮点 <table></table>	m/s

沿 Z 方向的速度(3D)	v{elocity}-z	浮点<table>	m/s
沿 X 方向的加速度	a{cceleration}-x	浮点<table>	m/s ²
沿 Y 方向的加速度	a{cceleration}-y	浮点<table>	m/s ²
沿 Z 方向的加速度(3D)	a{cceleration}-z	浮点<table>	m/s ²

表 21 锚杆节点的力的边界条件 (b{olt}-n{ode}-f{orce}-b{oundary}-c{onditio}) 参数输入表

参数	关键词	数据类型	单位
沿 X 方向的力	f{orce}-x	浮点<table>	N
沿 Y 方向的力	f{orce}-y	浮点<table>	N
沿 Z 方向的力(3D)	f{orce}-z	浮点<table>	N

8.0 PCDC 命令汇总

请参见程序主菜单 【help】 -> 【Online Commands】。

9.0 参考文献

Jaeger, J., Cook, N., Zimmerman, R., 2009. Fundamentals of Rock Mechanics. Wiley

Alfano, M.; Furgiuele, F.; Leonardi, A.; Maletta, C.; Paulino, G.H. Mode I fracture of adhesive joints using tailored cohesive zone models. Int. J. Fract. 2009, 157, 193.

Dugdale, D.S. Yielding of steel sheets containing slits. J. Mech. Phys. Solids 1960, 8, 100 – 104.

An B, Tannant DD (2007) Discrete element method contact model for dynamic simulation of inelastic rock impact. Comput Geosci 33:513–521

Tatone, B.S.A., Grasselli, G., 2015. A calibration procedure for two-dimensional laboratory-scale hybrid finite-discrete element simulations. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences 75, 56–72.

Munjiza A (2004) The combined finite-discrete element method. Wiley, New York

Munjiza A, Andrews KRF, White JK (1999) Combined single and smeared crack model in combined finite-discrete element analysis. Int J Numer Meth Eng 44:41–57.

Mahabadi OK, Lisjak A, Munjiza A, Grasselli G (2012) Y-Geo: new combined finite-discrete element numerical code for geomechanical applications. Int J Geomech 12:676–688.

Daisuke Fukuda, Mojtaba Mohammadnejad. Development of a 3D Hybrid Finite-Discrete Element Simulator Based on GPGP-Parallelized Computation for Modelling Rock Fracturing Under Quasi-Static and Dynamic Loading Conditions. Rock Mechanics and Rock Engineering (2020) 53:1079 – 1112

Fjær, E., Holt, R.M., Horsrud, P., Raaen, A.M., Risnes, R., 2008. Petroleum related rock mechanics. Elsevier. 2nd edition.

Carlslaw, H.S., Jaeger, J.C., 1959. Conduction of heat in solids. Oxford University Press.

Harr, M.E., 1962. Groundwater and seepage. Dover Publications

Eslami, M.R., Hetnarski, R.B., Ignaczak, J., Noda, N., Sumi, N., Tanigawa, Y., 2013. Theory of elasticity and thermal stresses. Springer.

