

DOI: 10.16285/j.rsm.2017.1182

基于细观试验和离散元法的盐岩力学特性

胡唯哲¹, 谢凌志^{2,3}, 岑望来³, 殷 实³, 罗云川¹, 赵 鹏¹

(1. 四川大学 建筑与环境学院, 四川 成都 610065; 2. 四川大学 深地科学与工程教育部重点实验室, 四川 成都 610065;

3. 四川大学 新能源与低碳技术研究院, 四川 成都 610207)

摘 要: 当前盐岩的宏观力学模型通常是唯象模型, 不能很好地解释盐岩受力变形破坏的真正物理基础。盐岩是由于化学沉积而形成的矿物集合体, 是一种主要由 NaCl 和少量杂质组成的多晶体, 其变形机制主要由晶粒与晶界的力学特性控制。通过扫描电镜 (SEM), 获得盐岩晶粒的微细观结构特征, 采用分子动力学方法和纳米压痕技术, 确定盐岩晶粒和晶界的微细观力学参数; 将盐岩晶粒作为块体, 基于 Voronoi 多边形技术, 建立盐岩的微细观数值模型; 利用离散元方法, 对盐岩试件在单轴压缩和直剪条件下的宏观力学行为进行了数值模拟。数值模拟结果与宏观力学试验结果吻合度高, 表明基于盐岩微细观晶粒结构特征并结合离散元数值模拟的方法能够较好地研究盐岩的宏观力学性能及其材料物理基础。

关 键 词: 盐岩; 离散元法; 分子动力学; 微细观模型

中图分类号: P 642.3

文献标识码: A

文章编号: 1000-7598 (2018) 06-2073-09

Mechanical characteristics of salt rock based on mesoscopic tests and discrete element method

HU Wei-zhe¹, XIE Ling-zhi^{2,3}, CEN Wang-lai³, YING Shi³, LUO Yun-chuan¹, ZHAO Peng¹

(1. College of Architecture and Environment, Sichuan University, Chengdu, Sichuan 610065, China;

2. Key Laboratory of Deep Underground Science and Engineering of Ministry of Education, Sichuan University, Chengdu, Sichuan 610065, China;

3. Institute of New Energy and Low-Carbon Technology, Sichuan University, Chengdu, Sichuan 610207, China)

Abstract: The current macro-mechanical models of salt rock are usually phenomenological models, which cannot fully explain the true physical mechanism of mechanical deformation and failure of salt rock. Salt rock is a polycrystalline aggregate, which mainly consists of NaCl and a few amounts of impurities formed in the geological lithification process. Its deformation mechanism is largely controlled by mechanical properties of the grain and grain boundary. The microstructure of the grain in salt rock was obtained by scanning electron microscopy (SEM), and the micro/meso mechanical parameters of the grain and grain boundary were determined by molecular dynamics (MD) and nanoindentation technologies. Based on the numerical Voronoi polygon technology, a microscopic numerical model of salt rock was established by regarding grains of salt rock as deformable blocks. The discrete element method (DEM) was adopted to perform numerical simulation on the macroscopic behaviour of salt rock specimens under uniaxial compression and direct shear. Numerical results are in good agreement with macro-mechanical experimental results, which indicates that the method proposed on the micro/meso grains of salt rock and the DEM can describe macroscopic mechanical properties well based on physical microstructure of salt rock.

Keywords: salt rock; discrete element method; molecular dynamics; micro/meso model

1 引 言

由于盐岩具有密闭性好、渗透性低、黏性大、且能损伤恢复等优点, 使得地下盐穴在地下能源储存、CO₂ 封存以及核废料填埋等领域被广泛的应用。

为确保地下盐穴储库运行的安全性和长期的稳定性, 对盐岩力学特性的研究是当前岩石力学的一个研究方向。目前对盐岩力学性能的研究主要以宏观试验和理论方法为主, 国外学者 Hunsche^[1]、Senseny^[2]、Wallner^[3]等通过单轴和三轴压缩试验,

收稿日期: 2017-08-21

基金项目: 国家自然科学基金 (No.51120145001, No.51104102)。

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (51120145001, 51104102).

第一作者简介: 胡唯哲, 男, 1993 年生, 硕士研究生, 主要从事岩土工程等方面的工作。E-mail: 1056291511@qq.com

通讯作者: 谢凌志, 男, 1976 年生, 博士, 教授, 主要从事岩土工程等方面的工作。E-mail: xielingzhi@scu.edu.cn

建立了以摩尔-库仑强度理论为基础的盐岩强度理论,指出盐岩是一种变形大、强度低的软岩。Popp 等^[4]对岩盐的损伤、强度、渗透性进行了研究,得到了岩盐的扩容边界线、压缩边界线、破坏边界线。Chan 等^[5]认为,盐岩非弹性变形是由蠕变、断裂、愈合和耦合作用产生的,建立了 MDCF 模型。国内学者刘江等^[6]通过盐岩单轴压缩试验、三轴压缩试验及巴西劈裂试验,对盐岩试样的短期强度和变形特征进行分析,获得盐岩的短期强度和变形的力学参数。马林建等^[7]基于 Lemaitre 等效应变原理,引入损伤蠕变分量建立了一种黏弹塑性损伤模型。王军保等^[8]基于非线性流变力学理论,提出了可以描述盐岩非线性蠕变特性的 MBurgers 模型。这些研究虽然能在一定范围内给出盐岩的强度破坏值,却无法从材料的物理机制角度有效解释盐岩的变形破坏机制。此外,一些学者尝试从微细观角度研究盐岩的力学性能,Desbois 等^[9]通过对盐岩表面进行扫描,得到盐岩晶粒与晶界的分布情况,但并没有进一步将其应用到盐岩的细观力学模型中来。Pouya^[10]通过滑移理论推导建立了盐岩的细宏观模型来解释盐岩单晶体的弹塑性力学行为,从而研究固体 NaCl 材料的微观力学性能,但由于工程尺度下的盐岩更多是以多晶体结构存在,因此,该方法不能直接应用在盐穴储库的围岩力学性能研究。陈剑文等^[11]基于固体位错理论建立了盐岩的塑性本构模型,但其模型的本构方程是对盐岩的塑性变形进行模拟,从而无法反映盐岩在压缩过程中微裂纹萌生、演化所导致的破裂过程。

为了更好地从微细观角度对岩石进行研究,近些年来,一些学者利用离散元法在岩石微细观力学特征开展了研究。Ghazvinian 等^[12]利用离散元法建立了脆性岩石细观断裂损伤模型。徐金明等^[13]利用离散元法建立了石灰岩细观结构模型。孙金山等^[14]利用离散元法建立了大理岩蠕变损伤细观结构模型。这些模型虽然与岩石实际模型吻合,但其细观参数大部分是通过宏观力学行为进行反演得到,由于细观参数较多,这样得到的细观参数具有不确定性。国内尚未利用离散元方法从细观角度研究盐岩的力学特征。

本文在对盐岩微细观多晶体结构特征研究的基础上,利用 Matlab 自主编程和 3DEC 建模构造出盐岩的多晶体几何模型,再通过分子动力学的方法,利用 Lammmps 计算和纳米压痕技术,得到晶粒与晶界的力学参数,参考 Ghazvinian 等^[12]建立的结晶岩体模型,通过离散元法计算基于盐岩微细观结构特

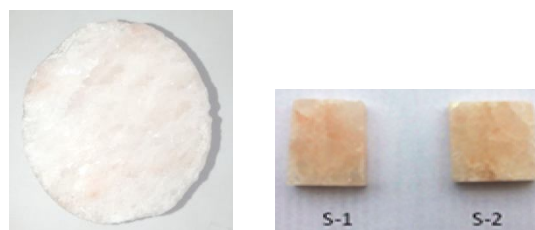
征的宏观力学特性。

2 盐岩的微细观参数确定

盐岩是典型的化学沉积成因的矿物,结晶形态为单轴晶系^[15],是一种主要由 NaCl 与少量杂质组成的晶体结构^[16]。晶粒尺寸与盐岩的产地以及埋深等有关^[9],为了合理地建立盐岩的多晶体模型,本文利用扫描电镜(scanning electron microscope, SEM)观察了盐岩试样粗抛光晶界面和细抛光晶界面,获得了盐岩晶粒与晶界的结构特征和分布参数。

2.1 试件准备

本试验岩样钻取自国内金坛盐岩地区盐岩地层,钻井深度为 1 200 m。从外观看,试样保存完好,无肉眼可见的裂纹及潮解痕迹。利用双面岩石切割机,将试样切割成高度为 20 mm、直径为 50 mm 的圆柱体,如图 1(a)所示。接着利用金刚砂线锯将小圆柱体切割成较小的两个试件,试件尺寸均为 20 mm×20 mm×5 mm 左右,编号为 S-1、S-2,如图 1(b)所示。最后利用 LP-1A 金相抛光机,先后使用 400#、800#及 2 000#的砂纸对 S-1、S-2 试件进行 3 次递进的深度研磨,为后期的扫描试验做准备。



(a) 盐岩短圆柱

(b) 加工后试样

图 1 盐岩短圆柱及加工后的成型状态

Fig.1 Short cylinder of rock salt and its moulded state

2.2 试验仪器及过程

本次 SEM 试验,采用 HZTACHZ-S08010 型扫描电镜。为了观察到盐岩晶界细部构造,使用日立 im4000 氩离子抛光机对 S-2 试件进行断面抛光。

2.3 低倍观察下的晶界断面 SEM 扫描结果

对 S-1 试件进行扫描,得到低倍观察下的晶界断面 SEM 结果,如图 2 所示。从图可以得到以下盐岩晶粒分布信息:①金坛地区盐岩试件的晶粒直径分布范围较广介于 100~1 250 μm 之间,属于细微粒结构^[16],平均晶粒直径约为 560 μm ,与文献[5]得到的结论相似;②盐岩不同位置的晶粒分布密度没有明显差异;③盐岩晶粒整体呈现不规则凸多边形特征,说明盐岩在结晶生长过程中,受到相邻晶

粒的影响,属于他形粒状结构^[16]。

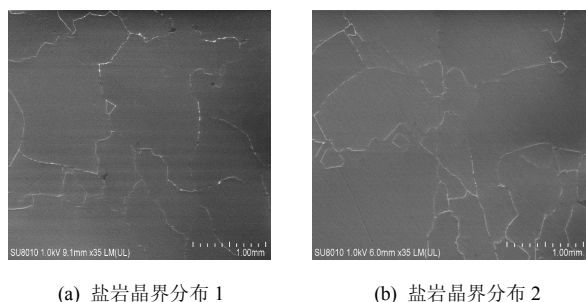


图 2 低倍观察下的晶界断面扫描电镜结果
Fig.2 SEM images of fractured surface of grain boundaries at the macroscopic observation

2.4 高倍观察下的晶界断面 SEM 结果

图 3 显示了试件 S-2 在高倍 SEM 下的晶界细部构造,试件在扫描前,经过氦离子研磨抛光,所以呈现出了更真实的盐岩晶界。图 3(a)~3(c)中的放大倍数逐渐放大,图 3(c)与图 3(d)的放大倍数一样。观察图 3(a)可以发现,除了晶粒边界的晶界外,在盐岩晶粒内部仍然存在着明显的细微晶界。图 3(b)~3(d)显示了更大倍数下不同位置的盐岩晶界形状,可以看到,盐岩晶界分明,厚度分布在 $0.1 \sim 1.0 \mu\text{m}$ 之间。这说明岩盐晶界的连续性较差,表明了岩盐微细观结构的不连续性,因此,本文从离散元的角度来分析盐岩的受力变形破坏特征。

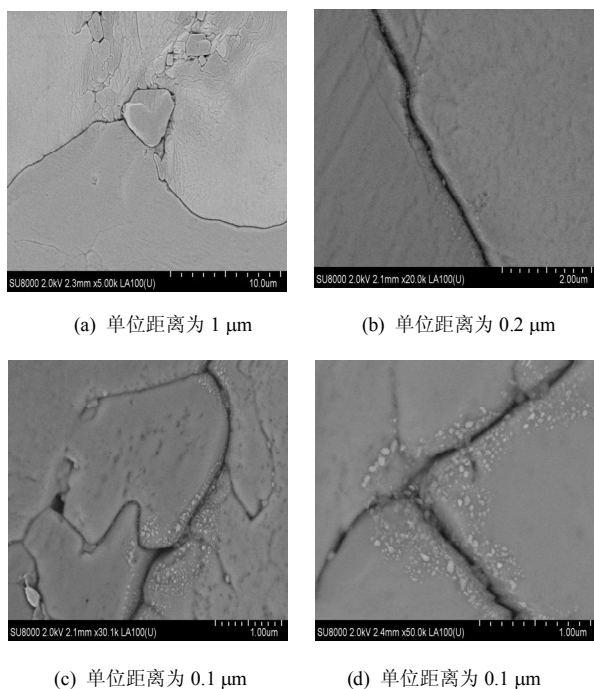


图 3 高倍观察下的晶界细部扫描结果
Fig.3 SEM images of detailed parts of grain boundaries at high magnifications

3 基于分子动力学的微观力学参数确定

要研究盐岩多晶体的力学特性,首先需要获得盐岩晶粒的力学参数。因为 NaCl 晶粒的结构简单,原子排布方式唯一且晶体纯度高,故而可以利用分子动力学相关原理计算盐岩力学特性。

基于 Lammmps 软件,采用 Born-Mayer-Huggins-Tosi 势函数^[17],进行盐岩晶粒力学特性的定量研究,目的在于获得完整盐岩晶粒的力学参数(诸如弹性模量、泊松比等)^[18]。

3.1 盐岩晶粒的分子动力学建模

完整盐岩晶粒的晶胞结构是正六面体的立方晶系结构,每个氯离子前、后、左、右与上、下共排布 6 个钠离子,而每个钠离子周围同样排布 6 个氯离子。其晶胞结构如图 4 所示,单个晶胞平均占有 4 个钠离子和 4 个氯离子。严格地说,盐岩单晶体是各向异性的,然而由于晶粒的空间随机排布,使得岩盐在宏观上基本是各向同性材料。本文将盐岩晶粒看做各向同性体。NaCl 晶体一些常用常数如表 1 所示。

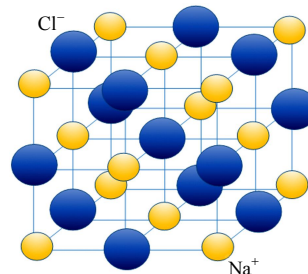


图 4 NaCl 晶体结构
Fig.4 Crystal structure of NaCl

表 1 NaCl 晶体常数
Table 1 Crystal constants of NaCl

晶胞参数/ \AA	分子量	密度/ (g/cm^3)	熔点/ K
5.65	58.45	2.17	1 070

3.2 盐岩单晶分子动力学模拟及结果

首先,为确定该模型在温度 300 K 下的平衡体积,采用 NPT 系综的分子动力学,并设定恒温温度为 300 K 、恒压压强为 0 MPa ,步长为 1 fs ,运行 100 ps ,统计后 50 ps 的平均体积作为 NaCl 在该温度下的平衡体积,并计算得到 NaCl 晶胞参数(用于确定晶胞的形状和大小)为 5.721 \AA 。在此基础上计算 NaCl 的其他力学性能参数。NaCl 单晶计算模型如图 5 所示。

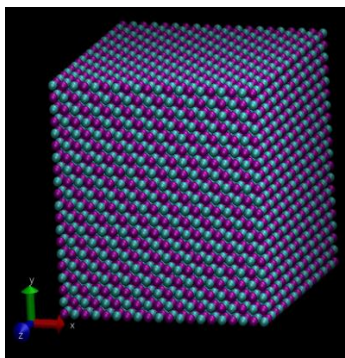


图 5 NaCl 单晶计算模型

Fig.5 Calculation model for a single crystal of NaCl

在 NPT (300 K) 分子动力学系综下, 保持 xy 两个方向的应力为 0, 改变 z 方向的长度使其产生 $-5\% \sim 5\%$ 的应变, 每 0.1% 为一步, 每步均在 NPT 系综下稳定 100 ps。统计后 50 ps 内 z 方向上的平均应力, 即得到该应变下的 z 方向上的应力; 统计 xy 两个方向的尺寸变化, 可以得到 NaCl 单晶的泊松比。如图 6 所示, 取 0.5% 应变处的应力计算出 NaCl 的弹性模量, 为 31.89 GPa, 泊松比为 0.268。

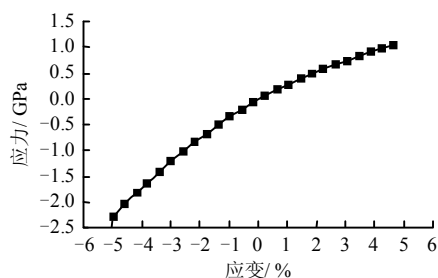


图 6 NaCl 单晶的单轴应力-应变曲线

Fig.6 Uniaxial stress-strain curve of a single crystal of NaCl

在 NPT (300 K) 分子动力学系综下, 改变模型在 xy 剪切方向上的倾斜角度, 使其产生 $-5\% \sim 5\%$ 的剪切应变, 每 0.1% 为一步, 每步均在 NPT 系综下稳定 100 ps。统计后 50 ps 内 xy 剪切方向上的平均剪切压力, 即得到在该剪切应变下的 xy 方向上的剪切应力, 如图 7 所示, 取 0.5% 剪切应变处的剪切应力计算出 NaCl 的剪切模量, 为 14.11 GPa。

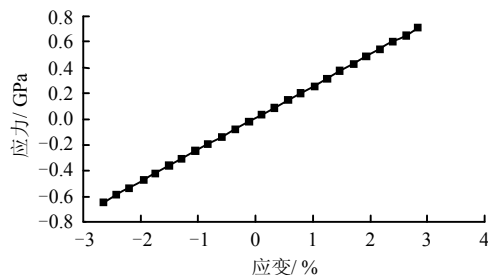


图 7 NaCl 单晶的剪切应力-剪切应变曲线

Fig.7 Shear stress-shear strain curve of a single crystal of NaCl

3.3 晶界黏聚力与摩擦角模拟结果

在本模拟中, NaCl 孪晶晶界的初始模型如图 8 所示。虚线表示孪晶的对称面, 初始模型中对称面两侧的晶体为完美晶体, 两侧晶体沿 y 方向旋转了一定的角度, 形成夹角为 α 的孪晶晶界。该模型在 x 和 y 两个方向上采用周期性边界条件, 但在 z 方向上的晶体只扩展了一定范围。

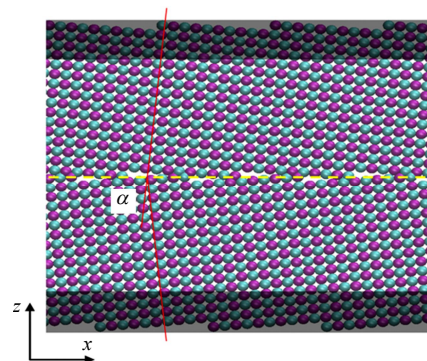


图 8 NaCl 晶界计算模型

Fig.8 Calculation model of grain boundary in NaCl

在实际情况下, 晶界区域的原子不具有周期性排列结构, 同晶体相比, 该区域的体积非常小。因此, 为在有限的分子动力学模型中构建 NaCl 晶界, 本模拟固定 z 方向上两端一定厚度的原子 (如图中灰色区域所示) 用来模拟两侧的晶体, 而中间原子可随温度和外力作用发生位移, 用来模拟晶界附近的情况。

晶界的方向可以用对应的晶面指数来表示, 如 (1,0,8) 晶界表示该晶界平行于 (1,0,8) 晶面。因此, 如图 8 所示, 孪晶晶界两侧晶体的夹角同该晶面指数有关。本文模拟中, 两侧晶体沿 y 轴旋转相同的角度形成孪晶, 晶界的方向可用 $(n,0,m)$ 来表示, 则夹角满足下式:

$$\alpha = 2 \arctan \left(\frac{n}{m} \right) \quad (1)$$

在满足周期性边界条件时, 为减少体系的原子数, 本研究只选取 5 个特殊方向的晶界, 表 2 列出这些晶界的方向和对应的夹角。

表 2 晶界方向及其对应的晶界角
Table 2 Direction of the grain boundary and corresponding boundary angle

晶界方向	(1,0,2)	(1,0,4)	(1,0,8)	(1,0,10)	(1,0,12)
晶界角/(°)	53.10	28.70	14.50	11.42	9.53

由摩尔-库仑准则 $\tau_n = c - \sigma_n \tan \varphi$ 可知, 当法向

压应力 $\sigma_n = 0$ 时, 黏聚力 c 就等于极限抗剪强度 τ_n 。因此, 在法向压应力为 0 的情况下, 利用分子动力学, 通过剪切加载, 计算出极限抗剪强度就可以求得孪晶界下不同角度下的黏聚力平均值为 2.1 GPa。

接着施加一定大小的法向压应力值, 通过之前求出的不同晶界角下的黏聚力值, 结合此时新的极限抗剪强度 τ_n , 就可以计算出不同晶界角下内摩擦角平均值为 31.48° 。

3.4 纳米压痕的对比研究

为了验证分子动力学的正确性, 对盐岩进行了纳米压痕试验^[19]。本次试验所采用的纳米测试仪器型号为 Agilent Technologies G200, 通过对尺寸为 $10\text{ mm} \times 10\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ 的盐岩块体进行加、卸载, 测得了盐岩晶体的弹性模量见表 3。

表 3 纳米压痕测得的弹性模量
Table 3 Elastic modulus measured by nanoindentation

试件编号	1	2	3	平均值
线弹性模量 E/GPa	31.5	35.4	34.7	33.8

分子动力学测得的结果 31.89 GPa, 与表中纳米压痕测得的平均值 33.8 GPa 十分接近, 从而证明了通过分子动力学计算盐岩弹性模量参数值的正确性。

4 基于 3DEC 的盐岩力学性能离散元法模拟

在上述工作的基础上, 本节将结合盐岩 SEM 试验结果与分子动力学计算结果, 利用离散元软件 3DEC 建立盐岩微细观数值计算模型, 并将数值模拟结果与文献[20–21]的试验结果行对比。

4.1 模型假设与简化

文献[20]对金坛地区盐岩进行了单轴试验, 圆柱试样高为 92~116 mm, 直径为 72~75 mm, 高径比范围为 1.23~1.55。文献[21]对金坛地区盐岩进行了直剪试验, 试件形状同样为圆柱, 试样高为 105~133 mm, 直径为 100 mm, 高径比范围为 1.05~1.33。如果两者都按照扫描得出的平均粒径 560 μm 建模, 大约需要几百万个块体, 这远远超出 3DEC 的计算范围。为提高计算效率, 将其表征的试验模型等比例缩小, 生成高为 9 mm、直径为 7 mm 的数值模型。此时数值模型高径比为 1.29, 同时满足单轴试验与剪切试验试样高径比范围。

4.2 盐岩建模方法

如前所述, 盐岩是一种主要由 NaCl 晶体组成

的多晶体, 由 NaCl 晶粒与晶界构成。在晶核形成晶粒的过程中, 基于晶体的层生长理论^[22], 最终会形成面平、棱直的多面体形态(晶粒的自限性), 又基于前面的细观试验结果, 盐岩属于他形粒状结构, 晶粒在结晶生长过程中, 受到相邻晶粒的影响, 呈现出不规则的凸多边形。为了更好地反映盐岩的结晶过程中的这两个真实物理特征, 本文采用 Voronoi 多边形的构成思路^[23]来建立盐岩的晶体块体模型。

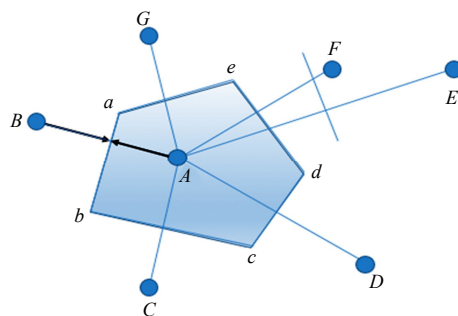


图 9 盐岩多晶体结晶示意图

Fig.9 Schematic of crystallisation of salt rock polycrystalline

如图 9 所示, 假设空间中某些点如 A 、 B 、 C 、 D 、 E 、 F 、 G 形成了初始晶核。在晶粒的形成过程中, 每个晶核会与身边所有的晶核竞争空间, 直至多晶体布满整个空间, 可以假定每个晶核的生长速度相似, 那么所有的晶界面都将在垂直平分线上产生。最后连接单个晶核 A 所有的晶界顶点就得到了晶粒 A 的空间区域 $abcde$ 。这样我们就能得到受到相邻晶粒影响的凸多边形。本文在凸多边形的思路下, 将采用 Voronoi 多晶体模型^[24–25]表征盐岩微细观结构。

首先本文利用 Matlab 软件, 在高为 9 mm、底为 7 mm 的长方体内, 随机生成由 2 500 个点组成的全部晶核, 以保证粒径的平均分布为 560 μm , 如图 10(a)所示。由于 Matlab 生成的 Voronoi 块体数据形式不支持 3DEC 中块体建模命令要求, 故对 Matlab 生成的块体数据进行处理, 计算出每个晶粒的点、线、面几何数据, 再将数据编写成 3DEC 读取文件的脚本, 将其导入 3DEC, 如图 10(b)所示。由于 3DEC 不识别曲面, 故而利用自编程序将模型处理成 24 棱柱体, 如图 10(c)所示。

4.3 数值模型的尺寸效应

在计算时, 模型的计算结果尺寸效应主要体现在高径比、颗粒粒径大小以及晶界密度^[26–27]。在保证模型真实高径比与真实平均粒径的情况下, 主要

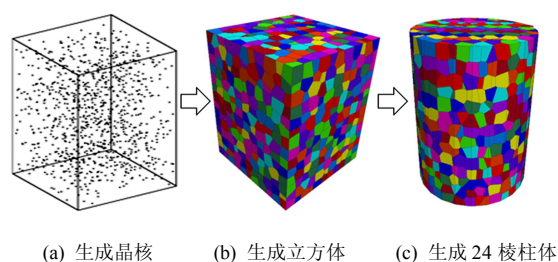


图 10 NaCl 多晶体 3DEC 模型建立过程

Fig.10 Establishment process of NaCl polycrystal 3DEC model

是晶界密度影响理论计算误差。该模型高为 9 mm、直径为 7 mm、高径比为 1.29, 同时满足单轴试验与剪切试验试样高径比范围。模型一共包含 2 080 个颗粒, 其晶粒平均粒径为 550 μm , 与试验扫描的平均粒径十分接近。模型的断面晶界分布形态见图 11, 可以看到, 单一晶粒在任何截面的晶界都是凸多边形。在直径方向, 直径为 70 mm 的实际模型包含的颗粒数较多, 数量超过 100 个。这里为了对晶界密度更加直观地进行说明, 假设每个块体都是长度为单位 1 的立方体, 那么对于直径为 70 mm 的实际模型而言, 其直径方向晶界密度 (同体积内, 晶界数量) 约为 1 (99 \div 100 = 0.99); 所建立的数值模型在直径方向包含的颗粒超过 10 个, 因此, 晶界密度大于 0.9 (9 \div 10 = 0.9)。数值模型与实际模型相比, 晶界密度误差控制在 10% 以内, 又因为实际建模颗粒的面数多于正方体的 6 个面, 因此, 相同体积内的晶界数会更多, 误差会更小。因此, 本模型在保证计算效率的前提下, 较好地解决了尺寸效应问题。

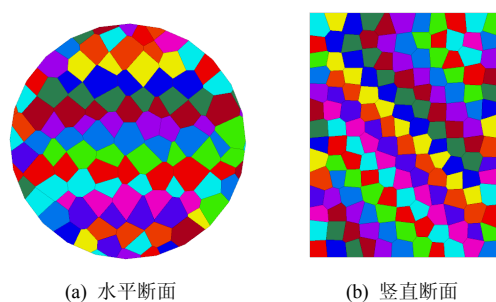


图 11 模型水平断面与竖直断面

Fig.11 Vertical and horizontal sections of the model

4.4 盐岩细观参数确定

在单轴压缩与直剪试验时, 盐岩晶粒的变化主要表现为 crystal slip plasticity (CSP) [28], 针对 CSP 模型, 结合之前分子动力学模拟结果与纳米压痕试验, 我们假设晶粒变为弹性变形, 在 3DEC 中采用各向同性 (cons = 1) 块体模拟。弹性模量与剪切模量

均已由分子动力学算出, 弹性模量为 31.89 GPa, 剪切模量为 14.11 GPa。

对晶界而言, 采用 Coulomb slip model。界面考虑法向刚度、切向刚度、黏聚力、内摩擦角。依据文献[29]中的公式, 晶界的法向刚度与切向刚度均可由晶界两侧的晶粒的弹性模量与剪切模量计算得出, 计算公式为

$$K_n = \frac{2E_1E_2}{t(E_1 + E_2)} \quad (2)$$

$$K_s = \frac{2G_1G_2}{t(G_1 + G_2)} \quad (3)$$

式中: K_n 、 K_s 分别为晶界的法向刚度与切向刚度; E_1 、 E_2 和 G_1 、 G_2 分别为相邻晶粒的弹性模量与剪切模量, 由于都是盐岩晶粒, 故这里 $E_1 = E_2$, $G_1 = G_2$; t 为晶界厚度, 根据前面细观扫描的结果, 其值分布在 0.1~1.0 μm 。

计算得到的晶界法向刚度为 $31.8 \times 10^6 \sim 31.8 \times 10^7$ GPa/m, 切向刚度为 $14.1 \times 10^6 \sim 14.1 \times 10^7$ GPa/m。在单轴压缩与直剪的数值试验中, 当法向刚度取 31.8×10^6 GPa/m、切向刚度取 14.1×10^6 GPa/m 时, 数值模拟的结果与试验结果最为接近。由之前分子动力学模拟结果, 黏聚力取 2.1 GPa, 内摩擦角取 31.48°。

4.5 盐岩力学特性的 3DEC 模拟结果与试验结果

4.5.1 单轴压缩数值试验

本文针对文献[20]的盐岩单轴试验进行了数值模拟, 加载方式采用承压板进行加载。为了获得模型等效应力, 取所有块体轴向应力值的平均值。试验数据来自文献[20]。

从图 12 可以看到, 本文盐岩单轴压缩数值计算结果与试验结果相比, 具有相似的破坏形态与应力-应变曲线形式。轴向应力为 0~7 MPa 时, 轴向应力-应变曲线类似直线, 处于弹性变形阶段, 其变形主要变现为晶粒的压缩, 横向则由于晶粒间所产生的挤压效应较小, 还未能使晶粒发生较大的位错和滑移 (见图 13); 轴向应力为 7~22 MPa 时, 处于塑性阶段, 此时晶粒沿轴向加载方向已经挤压密实, 横向晶粒之间的拉应力不断增大, 开始出现较大的破坏和滑移现象, 晶体开始出现微裂纹 (见图 13); 当应力超过峰值应力 22 MPa 后, 轴向应变缓慢降低, 横向塑性变形急剧增加, 出现较大的裂纹, 并随着应力增大, 裂纹密度和长度进一步增加 (见图 13)。

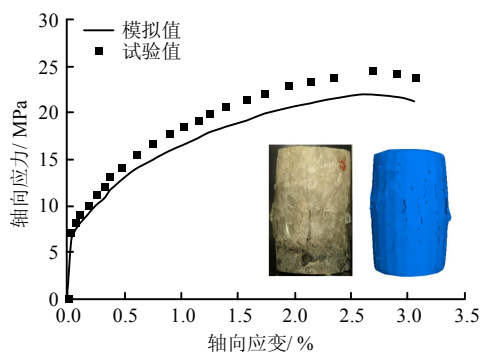


图12 单轴压缩数值模拟结果与试验结果对比

Fig.12 Comparison between numerical and experimental results under uniaxial compression

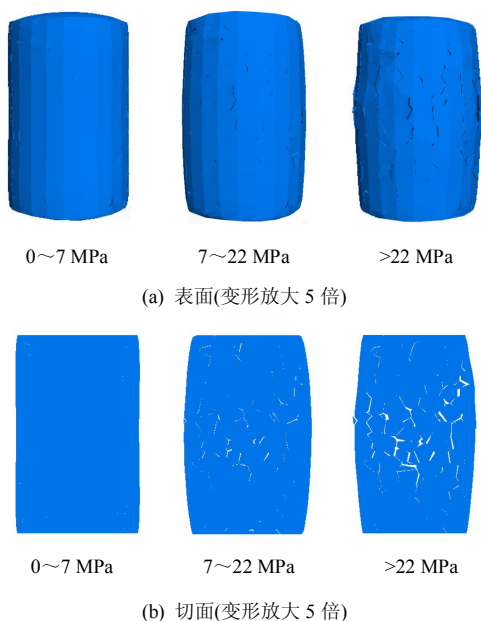


图13 单轴压缩下盐岩表面与切面变形

Fig.13 Surface and section deformations of salt rock under uniaxial compression

4.5.2 直剪数值试验

本文针对文献[21]的盐岩直剪试验进行了数值模拟,加载方式采用剪切盒进行加载。在加载过程中,如图14所示(为了清晰地显示剪切面,显示上隐藏了加载盒),可以看到一片不平直的整体剪切

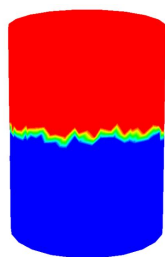


图14 直剪数值试验下的剪切面

Fig.14 Shear surface in the direct shear numerical test

面,这是由于剪切面由多个不在同一水平面上的晶界面形成的。

针对直剪数值模型,分别在法向应力为 2.5、5.0、7.5、10 MPa 的条件下进行模拟,分别得到其剪切变形的峰值应力,并与试验结果^[21]进行对比,如图15所示。

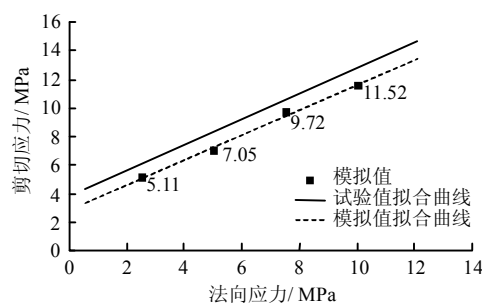


图15 直剪数值模拟结果与试验结果对比

Fig.15 Comparison between numerical and experimental results in direct shear tests

直剪试验的试样抗剪强度一般可以用摩尔-库仑准则表述,在已知法向应力与峰值剪切应力的情况下,利用摩尔-库仑准则,求出其宏观黏聚力与内摩擦角的值分别为 2.89 MPa、 41° ,与试验结果^[21]的 3.16 MPa、 44.7° 较为吻合。试样破坏形态如图16所示,可以清晰地看到剪切破坏的形态,随着剪切应力的增加,晶粒发生脆性破坏与滑移现象。

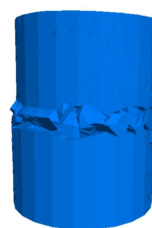


图16 直剪数值模拟下的盐岩破坏形态(变形放大5倍)

Fig.16 Failure mode of salt rock under the direct shear numerical simulation (deformation was magnified five times)

3DEC 模拟的单轴、直剪数值试验,不仅在数值结果上与实际试验较为接近,且从微观形态上,充分反映了盐岩的受力变形破坏特征。

5 结 论

本文通过扫描电镜、分子动力学计算和离散元数值模拟,建立了一套基于盐岩微观结构特征计算盐岩宏观力学特性的方法,该方法物理背景清晰,且与试验结果有较高的还原度。具体结论如下:

(1) 盐岩 SEM 结果显示, 金坛地区盐岩的确是由多晶体构成的复杂矿物, 晶粒粒径从 $10^{-3} \sim 10^{-1} \text{ mm}$ 不等, 平晶粒径约为 $560 \mu\text{m}$ 。

(2) 利用 Lammmps 软件, 进行了完整盐岩晶粒的力学特性模拟, 计算并获得了盐岩晶粒和晶界的力学参数, 并通过纳米压痕试验, 证明了分子动力学方法的正确性。

(3) 利用 Matlab 自主编程并与 3DEC 软件衔接, 建立了应用于 3DEC 的 3D Voronoi 多晶体模型来表征盐岩多晶体微细观结构。盐岩单轴压缩与直剪数值试验结果显示, 本文模型在数值结果和受力变形破坏特征上可以较好地与试验相吻合。

目前模型只进行了单轴试验, 后续将开展更为完整的系列试验对比, 将此方法应用到三轴宏观力学试验中, 并进一步完善。

参 考 文 献

- [1] HUNSCHE U, ALBRECHT H. Results of true triaxial strength tests on rock salt[J]. **Engineering Fracture Mechanics**, 1990, 35(4—5): 867—877.
- [2] SENSENY P E, HANSEN F D, RUSSELL J E, et al. Mechanical behaviour of rock salt: Phenomenology and micromechanisms[J]. **International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences & Geomechanics Abstracts**, 1992, 29(4): 363—378.
- [3] WALLNER M. Stability calculations concerning a room and pillar design in rock salt[C]//Proceedings of the 5th Congress of the International Society for Rock Mechanics. Rotterdam: A. A. Balkema, 1983.
- [4] POPP T, KERN H, SCHULZE O. Evolution of dilatancy and permeability in rock salt during hydrostatic compaction and triaxial deformation[J]. **Journal of Geophysical Research Solid Earth**, 2001, 106(B3): 4061—4078.
- [5] CHAN K S, BRODSKY N S, FOSSUM A F, et al. Damage-induced nonassociated inelastic flow in rock salt[J]. **International Journal of Plasticity**, 1994, 10(6): 623—642.
- [6] 刘江, 杨春和, 吴文, 等. 盐岩短期强度和变形特性试验研究[J]. **岩石力学与工程学报**, 2006, 25(增刊 1): 3104—3109.
LIU Jiang, YANG Chun-he, WU Wen, et al. Experiment study on short-term strength and deformation properties of rock salts[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2006, 25(Supp.1): 3104—3109.
- [7] 马林建, 刘新宇, 许宏发, 等. 循环荷载作用下盐岩三轴变形和强度特性试验研究[J]. **岩石力学与工程学报**, 2013, 32(4): 849—856.
MA Lin-jian, LIU Xin-yu, XU Hong-fa, et al. Deformation and strength properties of rock salt subjected to triaxial compression with cyclic loading[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2013, 32(4): 849—856.
- [8] 王军保, 刘新荣, 黄明, 等. 低频循环荷载下盐岩轴向蠕变的 Burgers 模型分析[J]. **岩土力学**, 2014, 35(4): 933—942.
WANG Jun-bao, LIU Xin-rong, HUANG Ming, et al. Analysis of axial creep properties of salt rock under low frequency cyclic loading using Burgers model[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2014, 35(4): 933—942.
- [9] DESBOIS G, ZÁVADA P, SCHLÉDER Z, et al. Deformation and recrystallization mechanisms in actively extruding salt fountain: Microstructural evidence for a switch in deformation mechanisms with increased availability of meteoric water and decreased grain size (Qum Kuh, central Iran)[J]. **Journal of Structural Geology**, 2010, 32(4): 580—594.
- [10] POUYA A. Micro-macro approach for the rock salt behaviour[J]. **European Journal of Mechanics-A/Solids**, 2000, 19(6): 1015—1028.
- [11] 陈剑文, 杨春和. 基于细观变形理论的盐岩塑性本构模型研究[J]. **岩土力学**, 2015, 36(1): 117—122.
CHEN Jian-wen, YANG Chun-he. Mesoscopic deformation based plastic constitutive model of salt rock[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2015, 36(1): 117—122.
- [12] GHAZVINIAN E, DIEDERICHS M S, QUEY R. 3D random Voronoi grain-based models for simulation of brittle rock damage and fabric-guided micro-fracturing[J]. **Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering**, 2014, 6(6): 506—521.
- [13] 徐金明, 谢芝蕾, 贾海涛. 石灰岩细观力学特性的颗粒流模拟[J]. **岩土力学**, 2010, 31(增刊 2): 390—395.
XU Jin-ming, XIE Zhi-lei, JIA Hai-tao. Simulation of mesomechanical properties of limestone using particle flow code[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2010, 31(Supp.2): 390—395.
- [14] 孙金山, 陈明, 姜清辉, 等. 锦屏大理岩蠕变损伤演化

- 细观力学特征的数值模拟研究[J]. 岩土力学, 2013, 34(12): 3601—3608.
- SUN Jin-shan, CHEN Ming, JIANG Qing-hui, et al. Numerical simulation of mesomechanical characteristics of creep damage evolution for Jingping marble[J]. **Rock and Soil Mechanics**, 2013, 34(12): 3601—3608.
- [15] 谷松, 王艳娟. 矿物岩石学基础[M]. 郑州: 黄河水利出版社, 2016.
- GU Son, WANG Yan-juan. The basis of petrology and mineralogy[M]. Zhengzhou: The Yellow River Water Conservancy Press, 2016.
- [16] 何法明. 盐类矿物鉴定工作方法手册[M]. 北京: 化学工业出版社, 1988.
- HE Fa-ming. Manual of identifying saline minerals[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 1988.
- [17] FUMI F G, TOSI M P. Ionic sizes and born repulsive parameters in the NaCl-type alkali halides—I: The Huggins-Mayer and Pauling forms[J]. **Journal of Physics & Chemistry of Solids**, 1964, 25(1): 31—43.
- [18] 陈丽. FCC 晶体弹性常数的分子动力学模拟及其适用性[J]. 机械工程学报, 2005, 41(9): 46—50.
- CHEN Li. Calculation and applicability analysis for elastic constants of FCC crystal[J]. **Chinese Journal of Mechanical Engineering**, 2005, 41(9): 46—50.
- [19] 朱瑛, 姚英学, 周亮. 纳米压痕技术及其试验研究[J]. 工具技术, 2004, 38(8): 13—16.
- ZHU Ying, YAO Ying-xue, ZHOU Liang. Nano-indentation technology and it's experimental research[J]. **Tool Engineering**, 2004, 38(8): 13—16.
- [20] 刘建锋. 中国层状盐岩基本力学特性及损伤演化研究[D]. 成都: 四川大学, 2008.
- LIU Jian-feng. The basic mechanical property and damage evolution research of layered rock salt in China[D]. Chengdu: Sichuan University, 2008.
- [21] 姚院峰, 杨春和, 纪文栋. 基于直剪试验的金坛盐岩力学特性研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2011, 30(增刊 1): 107—113.
- YAO Yuan-feng, YANG Chun-he, JI Wen-dong. Study of mechanical properties of Jintan salt rock based on direct shear tests[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2011, 30(Supp.1): 107—113.
- [22] 李胜荣. 结晶学与矿物学[M]. 北京: 地质出版社, 2008.
- LI Sheng-rong. Crystallography and mineralogy[M]. Beijing: Geological Publishing House, 2008.
- [23] 周培德. 计算几何: 算法设计与分析[M]. 北京: 清华大学出版, 2008.
- ZHOU Pei-de. Computational geometry: algorithm design and analysis[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2008.
- [24] OKABE A, BOOTS B, SUGIHARA K, et al. Spatial tessellations: Concepts and applications of Voronoi diagrams[M]. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1992: 357—363.
- [25] QUEY R, DAWSON P R, BARBE F. Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing[J]. **Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering**, 2011, 200(17—20): 1729—1745.
- [26] 梁正召, 张永彬, 唐世斌, 等. 岩体尺寸效应及其特征参数计算[J]. 岩石力学与工程学报, 2013, 32(6): 1157—1166.
- LIANG Zheng-zhao, ZHANG Yong-bin, TANG Shi-bin, et al. Size effect of rock masses and associated representative element properties[J]. **Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering**, 2013, 32(6): 1157—1166.
- [27] 杨圣奇, 苏承东, 徐卫亚. 岩石材料尺寸效应的试验和理论研究[J]. 工程力学, 2005, 22(4): 112—118.
- YANG Sheng-qi, SU Cheng-dong, XU Wei-ya. Experimental and theoretical study of size effect of rock material[J]. **Engineering Mechanics**, 2005, 22(4): 112—118.
- [28] BOURCIER M, DIMANOV A, HÉRIPRÉ E, et al. Full field investigation of salt deformation at room temperature: Cooperation of crystal plasticity and grain sliding[J]. **Mechanical Behavior of Salt VII**, 2012, 25(1): 37—43.
- [29] 陈姗姗, 李宏伟, 杨合. 弹黏塑性晶界变形损伤本构模型[J]. 塑性工程学报, 2014, 21(2): 13—19.
- CHEN Shan-shan, LI Hong-wei, YANG He. Elastic-viscoplastic constitutive model of grain boundary deformation and damage[J]. **Journal of Plasticity Engineering**, 2014, 21(2): 13—19.