

DOI: 10.11779/CJGE201404019

甲烷水合物三维离散元模拟参数反演初探

蒋明镜^{1, 2, 3}, 贺洁^{1, 2, 3}, 申志福^{1, 2, 3}

(1. 同济大学土木学院地下建筑与工程系, 上海 200092; 2. 同济大学岩土及地下工程教育部重点实验室, 上海 200092;
3. 同济大学土木工程防灾国家重点实验室, 上海 200092)

摘要: 含填充型水合物的砂性能源土可视为特殊的散粒体材料(砂粒和水合物颗粒混合物), 具有明显的非连续特征。在离散元中若采用团粒(胶结成团的颗粒组)模拟填充水合物颗粒则需合理确定团粒结构内颗粒间胶结模型参数。为此, 基于前人的室内纯水合物三轴试验资料进行离散元建模与参数反演。结果表明, 宜采用松散且颗粒间摩擦系数较小的试样模拟水合物块体, 当颗粒间摩擦系数小于等于 0.04 时, 可确保无胶结试样的内摩擦角小于室内试验获得的纯水合物内摩擦角。胶结刚度只需在较小范围变化即可反映相同温度不同围压条件下的弹性特性, 且微观刚度参数与胶结强度参数的相互作用较小, 可以假定二者相互独立。通过选取不同的微观胶结强度值进行不同围压下的三轴压缩试验, 建立微观胶结强度参数与宏观参数(内摩擦角和黏聚力)之间的关系, 从而确定与室内试验强度特性相符合的微观胶结强度值, 实现甲烷水合物三轴试验离散元模拟; 由体变规律可知, 甲烷水合物在发生剪胀前均存在一个初始的体积收缩阶段, 且剪胀特性随着围压的减小而呈现增强趋势。通过微观变量颗粒接触方向组构的分布图可知, 随着轴向应变增大, 颗粒间接触主方向朝竖直方向偏转, 表现出明显的各向异性特性。随着轴向应变的增大, 颗粒间胶结残余率变小, 表明试样逐步破坏。

关键词: 甲烷水合物; 离散单元法; 参数反演; 胶结模型; 各向异性; 颗粒间胶结残余率

中图分类号: TU41 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4548(2014)04-0736-09

作者简介: 蒋明镜(1965-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事天然结构性黏土、砂土、非饱和土的宏、微观试验、本构模型和数值分析方面的研究以及土体渐进破坏分析, 并从事相关的教学工作。E-mail: mingjing.jiang@tongji.edu.cn。

Preliminary investigation on parameter inversion for three-dimensional distinct element modeling of methane hydrate

JIANG Ming-jing^{1, 2, 3}, HE Jie^{1, 2, 3}, SHEN Zhi-fu^{1, 2, 3}

(1. Department of Geotechnical Engineering, College of Civil Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China; 2. Key Laboratory of Geotechnical & Underground Engineering of Ministry of Education, Tongji University, Shanghai 200092, China; 3. State Key Laboratory of Disaster Reduction in Civil Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: Marine sandy sediments containing pore-filling type methane hydrate particles can be considered as a class of special granular materials which present apparent discontinuity characteristics. To numerically simulate such materials, the distinct element method (DEM) can be used by modeling methane hydrate particles as groups of spheres cemented together and filled into the pores of soil skeleton. The model parameters for inter-particle bonds within an individual hydrate particle are investigated through parameter inversion against the existing laboratory triaxial compression (TC) test results of methane hydrate blocks under various confining pressures. The results indicate that a loose packing with low inter-particle friction needs to be used for the simulated methane hydrate block. When the inter-particle friction coefficient is equal to or less than 0.04, the friction angle obtained from the unbounded sample is less than that of the experimental tests. The bond stiffness varying in a very small range can adequately capture the elastic behavior of methane hydrate under different confining pressures at the same temperature. Because the interaction between stiffness parameters and bond strength parameters is small, it is assumed that the two types of parameters should be independent. The relationships between micro bond strength parameters and macro parameters (internal friction angle and cohesion) are established by conducting TC tests on choosing different micro bond strength parameters. The methane hydrate shows volume contraction, then dilatancy. And the characteristic dilatancy increases with the decrease of the confining pressure. With the increase of the axial strain, the grain contact direction deflects

基金项目: 国家杰出青年基金项目(51025932); 教育部博士点基金项目(20100072110048); 国家自然科学基金重点项目(51239010)
收稿日期: 2013-07-03

to the vertical direction and shows obvious anisotropic characteristics. The percentage of the intact bonds decreases and the sample is gradually destroyed with the increase of the axial strain.

Key words: methane hydrate; DEM; parameter inversion; bond model; anisotropy; percentage of intact bonds

0 引言

天然气水合物 (natural gas hydrate, 简称 gas hydrate) 是在一定条件 (合适的温度、压力、气体饱和度、水的盐度、pH 值等) 下由水和天然气组成的类冰笼形结晶化合物, 其遇火即可燃烧, 故俗称可燃冰。形成天然气水合物的主要气体为甲烷, 对甲烷分子含量超过 99% 的天然气水合物通常称为甲烷水合物 (methane hydrate) [1]。

天然气水合物在自然界广泛分布在大陆永久冻土、海洋和一些内陆湖的深水环境 [2]。标准状况下, 单位体积的水合物分解最多可产生 164 单位体积的甲烷气体 [3], 因而被誉为 21 世纪具有商业开发前景的战略资源 [4]。为此, 世界发达国家纷纷投入巨资相继开展了本土和国际海底天然气水合物的调查研究工作, 同时美、日、加等国已经制定了勘查和开发天然气水合物的国家计划 [5]。尤其是日本在勘查和开发天然气水合物的能力方面已处于领先地位。2013 年 3 月 12 日日本成功从爱知县附近深海可燃冰层中提取出甲烷, 成为世界上首个掌握海底可燃冰采掘技术的国家。

天然气水合物藏的商业开采势必会改变天然气水合物赖以赋存的温压条件, 引起天然气水合物的分解。而水合物的分解, 可能诱发一系列岩土工程问题, 如地层变形、海底滑坡及水合物勘探平台的倒塌等 [6]。因此含水合物沉积物 (俗称能源土) 力学性质的相关研究是水合物安全开采的基础研究课题之一。存在于砂土层中的水合物具有很大商业开采潜力, 因此砂性能源土是目前研究的主要对象。

能源土的力学性质主要受水合物在土中的分布模式、含量、胶结特性等因素的影响 (Soga 等 [7]、Winter 等 [8])。水合物在能源土中主要有填充型和胶结型两种存在形式 [9], 如图 1 所示。填充型水合物是指水合物分散存在于土体孔隙中, 胶结型水合物是指水合物作为胶结物质存在于土颗粒接触处。水合物的存在与分解, 必定对土体力学特征有影响。为此国内外学者 (Waite 等 [10]、Hyodo 等 [11]、Winters 等 [12]、Miyazaki 等 [13]、张旭辉等 [14-15]、颜荣涛等 [16]) 在室内合成了砂性能源土试样并进行了一系列三轴试验, 研究水合物同能源土力学特性的关系, 以弄清其力学响应。然而由于技术限制, 室内试验难以揭示复杂宏观现象的微观机理, 必定影响其本构理论的建立。而离散单元法 (distinct element method, 简称 DEM) [17] 将土体视为

一系列离散单元颗粒的组合, 从微观结构出发模拟能源土的宏微观力学特性, 能全面反映颗粒集合体在不同加载情况下的宏微观响应。国内外相关学者针对水合物沉积物已开展了一些卓有成效的 DEM 数值模拟, 如英国剑桥大学 Soga、伦敦大学学院 Helen Cheng、同济大学蒋明镜等研究团队。英国剑桥大学 Soga 和伦敦大学学院 Helen Cheng 团队在研究水合物沉积物的特性时, 出发点是填充型水合物, 随着水合物饱和度的增大, 水合物在水合物沉积物试样中的微观分布形式会有一个不断发展变化的过程, 逐步展现出胶结型水合物的特性。而同济大学蒋明镜研究团队, 针对含水合物沉积物 (俗称能源土) 的力学特性研究的出发点是胶结型水合物。研究思路是: 基于室内胶结接触模型试验, 直接建立反映能源土颗粒间水合物力学特性的微观胶结模型, 将模型程序化并引入离散单元法中, 进而确定合适的微观胶结模型参数以模拟能源土宏观力学特性。

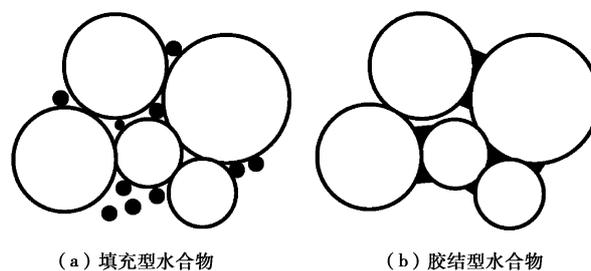


图 1 水合物沉积物中水合物的存在形式

Fig. 1 Pore-scale distribution of methane hydrate in methane hydrate-bearing sediments

本团队主要是考虑到胶结型水合物对整体强度的贡献比其他存在形式来得更大, 尤其是饱和度较低的情况下更是如此, 之前工作着重研究胶结型水合物, 其他形式水合物以及不同形式水合物同时存在的形式, 在进一步研究中, 而本文就是为了研究填充型水合物及不同形式水合物同时存在的能源土特性而开展的最初有关水合物本身性质的研究, 低温高压条件下的甲烷水合物材料特性三维离散元模拟。

Jiang 等 [18] 采用简化胶结模型通过离散元数值方法模拟了能源土的力学特性, 并与已有室内能源土三轴试验对比 [13], 验证了胶结接触模型的合理性。蒋明镜等 [19] 采用离散单元法对胶结型能源土的宏观力学特性进行了数值模拟分析。Brugada 等 [3] 通过随机生成土颗粒并在土颗粒的孔隙中生成定量的球形水合物颗

粒研究了含填充型水合物的能源土的力学特性。本文研究内容主要针对后者。

对于含填充型水合物的砂性能土,可将其视为特殊的散粒体材料(砂粒和水合物颗粒混合物),具有明显的非连续特征。由于实际粒间填充水合物颗粒形状各不相同且在受力过程中可破碎,这一过程既取决于水合物本身的力学特性,受控于砂粒集合体的组构与受力状态,又反过来影响能源土的宏观力学特性,因此在离散元模拟中有必要先探索模拟水合物的方法。Hyodo等^[11]、Song等^[20]、Yu等^[21]进行了大量甲烷水合物室内三轴试验,发现其抗剪强度和弹性模量与围压、温度条件密切相关。用离散元模拟多颗粒胶结而成的水合物团粒必须能反映其强度和刚度与围压和温度关系的特点。为此,将水合物块体视为由大量离散元颗粒通过强胶结作用凝聚而成的整体并采用离散元模拟。基于Hyodo等^[11]已开展的室内纯水合物三轴试验进行参数反演,确定合适的离散元接触模型参数。

1 胶结模型

将纯水合物视为由圆球颗粒和颗粒间胶结物构成的胶结材料。选用平行胶结模型(parallel-bond model)模拟胶结物的力学特性^[22]。该模型将胶结物视为连接相邻两球的短圆柱,如图2所示。接触处的相对运动在胶结物内产生力和力矩,作用于相互连接的颗粒上。接触力和力矩用 \bar{F}_i 和 \bar{M}_i 表示,并沿接触面分解为法向分量和切向分量:

$$\bar{F}_i = \bar{F}_i^n + \bar{F}_i^s, \quad (1)$$

$$\bar{M}_i = \bar{M}_i^n + \bar{M}_i^s, \quad (2)$$

式中, \bar{F}_i^n 表示法向接触力, \bar{F}_i^s 表示切向接触力, \bar{M}_i^n 表示扭转力矩, \bar{M}_i^s 表示弯曲力矩。

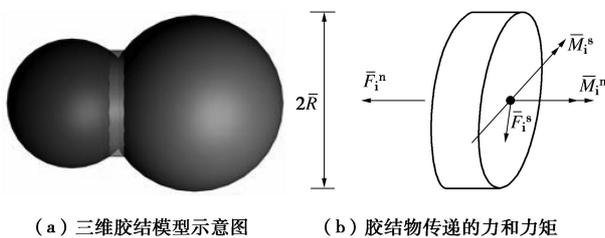


图2 平行胶结模型^[22]

Fig. 2 Parallel bond model^[22]

平行胶结模型由法向刚度 \bar{k}^n 、切向刚度 \bar{k}^s 、法向强度 $\bar{\sigma}_c$ 、切向强度 $\bar{\tau}_c$ 和胶结短圆柱半径 \bar{R} 5个参数定义。根据平行胶结模型关于胶结物内部应力分布的假定,最大法向和切向应力可表示为

$$\bar{\sigma}^{\max} = \frac{-\bar{F}^n}{A} + \frac{|\bar{M}^s| \bar{R}}{I}, \quad (3)$$

$$\bar{\tau}^{\max} = \frac{|\bar{F}^s|}{A} + \frac{|\bar{M}^n| \bar{R}}{J}, \quad (4)$$

式中, A 、 J 、 I 分别表示胶结接触面积、横截面的极惯性矩、横截面惯性矩, $A = \pi \bar{R}^2$, $J = 0.5 \pi \bar{R}^4$, $I = 0.25 \pi \bar{R}^4$ 。

当计算得到的 $\bar{\sigma}^{\max}$ 、 $\bar{\tau}^{\max}$ 满足 $\bar{\sigma}^{\max} \geq \bar{\sigma}_c$ 、 $\bar{\tau}^{\max} \geq \bar{\tau}_c$ 两者之一时平行胶结破坏。

为了减少参数反演中的自由变量,节省计算时间,选择如下离散元分析中常用的刚度关系:

$$\bar{k}^n = 1.5 \bar{k}^s. \quad (5)$$

对于平行胶结模型中的强度参数($\bar{\sigma}_c$ 、 $\bar{\tau}_c$),借鉴参考文献[17]设定法向强度 $\bar{\sigma}_c$ 、切向强度 $\bar{\tau}_c$ 满足

$$\bar{\sigma}_c = \bar{\tau}_c. \quad (6)$$

短圆柱胶结物的半径 \bar{R} 与接触处两球的半径 R_1 、 R_2 存在如下关系^[23]:

$$\bar{R} = \bar{\lambda} \min(R_1, R_2), \quad (7)$$

式中, $\bar{\lambda}$ 为量纲为一参数,借鉴文献[24],将 $\bar{\lambda}$ 设置为0.5。

必须说明,三维离散元参数反演的过程是一个不断尝试又极其费时间的过程,因此在参数反演中进行了上述简化处理,故本文得到的反演值并非唯一解。

2 室内纯水合物试验简介

Hyodo等^[11]采用低温高压三轴试验仪对纯水合物的力学特性开展了研究,分别进行了 -30°C 下1.5, 4, 8 MPa 3种围压和8 MPa围压下 -30°C 、 -10°C 、 5°C 3种温度条件的三轴压缩试验,得到了围压和温度对纯水合物力学特性的影响。在 -30°C 下,强度包线如图3所示,拟合可得破坏包线方程如下:

$$\tau_f = 0.19\sigma + 2.16. \quad (8)$$

由此可知室内试验中水合物的内摩擦角为 10.8° ,黏聚力为2.16 MPa。

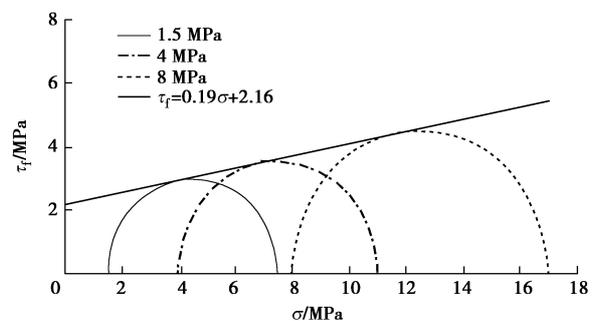


图3 纯水合物破坏包线(-30°C)

Fig. 3 Failure envelope of pure methane hydrate (-30°C)

3 离散元三轴试样的模型参数反演

3.1 孔隙比和粒间摩擦系数

已有离散元模拟结果表明, 粒间胶结物能够提高散粒体材料的内摩擦角和黏聚力, 如图 4 所示。因而, 为了使得离散元模拟的纯水合物的内摩擦角为 10.8° , 需确保无胶结试样的内摩擦角小于 10.8° 。影响无胶结试样内摩擦角大小的原因有两方面, 一是离散元生成试样的密实状态, 二是颗粒间的摩擦系数。离散元试样越密实, 颗粒间摩擦系数越大, 内摩擦角越大。在本文模拟中, 无胶结试样应该尽量松散且颗粒间摩擦系数相对较小。

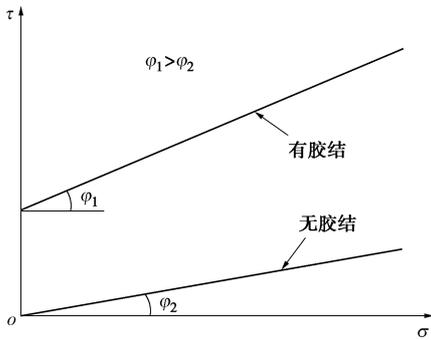


图 4 颗粒间胶结物对散粒体材料强度的影响

Fig. 4 Effect of inter-particle bond on strength of granular materials

采用 Jiang 等^[25]提出的分层欠压法 (UCM 法) 生成初始孔隙比为 0.82, 长宽高分别为 6.74, 6.74, 13.5 mm 的长方体松散试样, 颗粒采用 0.2 mm 的单一粒径, 颗粒数目为 10000, 如图 5 所示。

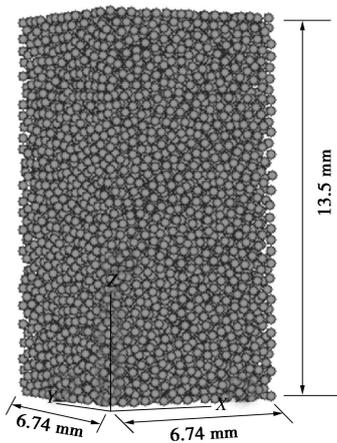


图 5 三维离散元试样

Fig. 5 Three-dimensional distinct element specimen

采用 4 种不同的颗粒间摩擦系数 ($\mu=0.01, 0.03, 0.05, 0.10$) 进行试算, 得到 $\sin \varphi - \mu$ 的关系曲线, 如图 6 所示。其中 $\sin \varphi$ 与峰值时的大小主应力 σ_{1f}, σ_{3f}

关系为

$$\sin \varphi = \frac{\sigma_{1f} - \sigma_{3f}}{\sigma_{1f} + \sigma_{3f}} \quad (9)$$

根据图 6 关系, 当 $\mu \leq 0.04$ 时, 无胶结试样的内摩擦角都小于室内试验中纯水合物的内摩擦角 10.9° ; 故当颗粒间摩擦系数 $\mu \leq 0.04$ 时都满足要求。文中采用颗粒间摩擦系数 $\mu=0.04$ 。

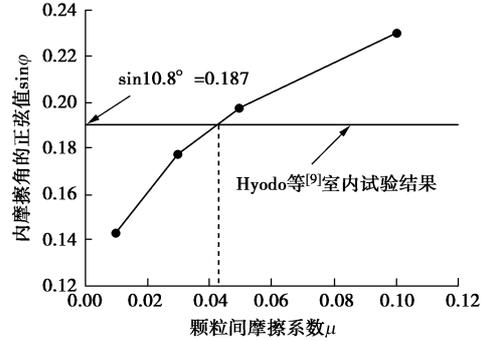


图 6 颗粒间摩擦系数对无胶结试样内摩擦角的影响

Fig. 6 Effect of inter-particle friction coefficient on peak friction angle of unbonded samples

3.2 刚度系数

根据式 (5) 给出的胶结法向和切向刚度的假设关系, 在 -30°C , 微观胶结强度 $\bar{\sigma}_c=20 \text{ MPa}$ 时, 1.5, 4, 8 MPa 围压下分别选定一系列刚度值 ($\bar{k}^n=3 \times 10^{10}, 3 \times 10^{11}, 3 \times 10^{12}, 3 \times 10^{13}, 3 \times 10^{14} \text{ N/m}^3$) 进行三轴压缩试验, 得出宏观参数初始弹性模量 E 与微观刚度参数 \bar{k}^n 之间的关系, 如图 7 所示。将离散元模拟获得的应力应变关系与 Hyodo 等^[11]室内试验结果对比, 当初始弹性模量的取值范围在 (250 MPa, 300 MPa) 时所对应的胶结刚度范围 ($1 \times 10^{11} \text{ N/m}^3, 1 \times 10^{12} \text{ N/m}^3$) 为所需胶结刚度值。平行胶结模型中的两个刚度参数在一定范围内变化即可模拟 -30°C 、不同围压条件下的水合物弹性特性。当法向和切向刚度分别为 $\bar{k}^n=3 \times 10^{11} \text{ N/m}^3$ 和 $\bar{k}^s=2 \times 10^{11} \text{ N/m}^3$ 时, 离散元模拟水合物的弹性特性与室内试验结果较符合。故本文选取胶结法向和切向刚度分别为 $\bar{k}^n=3 \times 10^{11} \text{ N/m}^3$ 和 $\bar{k}^s=2 \times 10^{11} \text{ N/m}^3$ 。

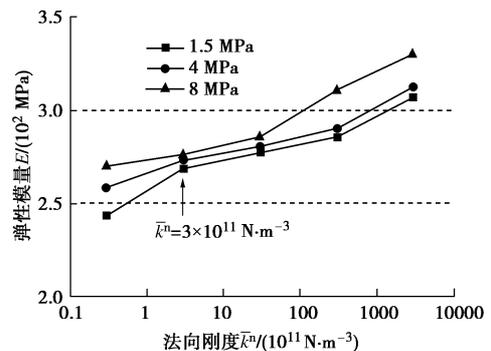


图 7 弹性模量与胶结刚度关系

Fig. 7 Relationship between elastic modulus and stiffness parameter

3.3 粒间胶结强度参数

按照前述式(6),基于Hyodo等^[11]室内水合物试验得出的峰值强度,反演微观胶结强度。需要强调,离散元模拟中的应力应变关系呈现出软化特性,与室内试验结果的硬化特性有所不同。但将纯水合物视为大量颗粒相互胶结的集合体填充到土颗粒中,水合物团粒的破碎由峰值强度控制,故选择室内试验的峰值强度值作为反演微观参数的标准仍可反映纯水合物这种特定材料的强度特性。

现以 -30°C ,不同围压为例介绍强度参数反演具体流程。首先在较大范围内选择5组微观胶结强度($\bar{\sigma}_c=50, 35, 25, 15, 5\text{ MPa}$)分别在1.5, 4, 8 MPa围压作用下进行试算,得到此时的应力应变关系曲线,然后求解各胶结强度作用下的内摩擦角和黏聚力值,分别绘制微观胶结强度与内摩擦角,微观胶结强度与黏聚力的关系图,如图8所示。此外,微观刚度参数与胶结强度参数的相互作用较小,可以假定二者相互独立。故在寻找微观胶结强度与宏观参数(内摩擦角和黏聚力)的关系时,此时平行胶结模型的刚度系数分别为 $\bar{k}^n=3\times 10^{11}\text{ N/m}^3$, $\bar{k}^s=2\times 10^{11}\text{ N/m}^3$ 。

根据图8可知,要获得与室内试验相符合的内摩擦角和黏聚力,此时的微观胶结强度 $\bar{\sigma}_c$ 应该在(15 MPa, 25 MPa)范围之内。

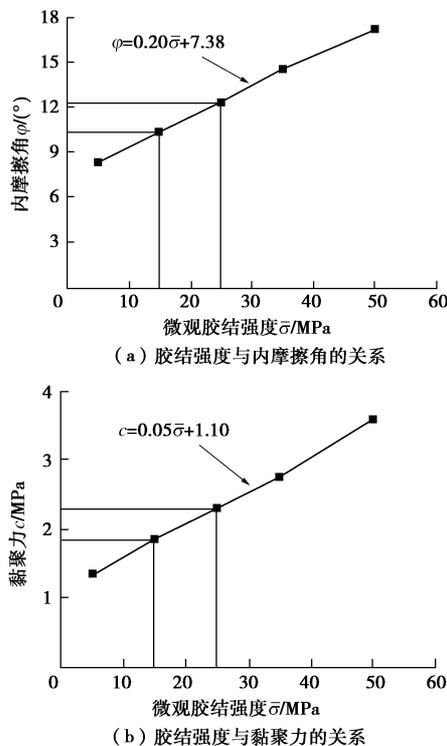


图8 不同胶结强度参数与内摩擦角、黏聚力的关系(-30°C)
Fig. 8 Relationship among bond strength values, internal friction angle and cohesion (-30°C)

表1给出了 -30°C ,围压分别为1.5, 4, 8 MPa下,Hyodo等^[9]室内水合物试验得出的偏应力 $\sigma_1 - \sigma_3$ 和微观胶结强度 $\bar{\sigma}_c=20\text{ MPa}$ 时反演获得的偏应力结果对比。当 $\bar{\sigma}_c=20\text{ MPa}$ 时,1.5, 4, 8 MPa围压下的峰值强度分别为5.73, 7.20, 8.90 MPa,此时的内摩擦角和黏聚力分别为 11.4° , 2.1 MPa,与试验结果符合较好。

故平行胶结模型的刚度和强度参数分别确定为 $\bar{k}^n=3\times 10^{11}\text{ N/m}^3$, $\bar{k}^s=2\times 10^{11}\text{ N/m}^3$, $\bar{\sigma}_c = \bar{\tau}_c=20\text{ MPa}$ 。

表1 -30°C 下不同围压宏观偏应力结果对比

Table 1 Comparison of macro-micro deviatoric stresses under different confining pressures at -30°C

围压/MPa	8	4	1.5
$(\sigma_1 - \sigma_3)/\text{MPa}$	9.08	7.10	5.94
$(\sigma_1 - \sigma_3)/\text{MPa}$ ($\bar{\sigma}_c = \bar{\tau}_c = 20\text{ MPa}$)	8.98	7.20	5.73

4 DEM数值模拟结果

下面介绍采用这一套参数进行甲烷水合物三轴压缩试验结果,并通过微观变量分析其微观力学特性,研究宏微观力学特性间的相互联系。

4.1 与前人试验结果对比

图9给出了 -30°C 时,3种围压(1.5, 4, 8 MPa)下数值模拟获得的应力应变关系与相同温压的室内试验应力应变结果对比。由图可知,反演获得的胶结强度参数能较好地反映水合物的宏观特性中的峰值强度值。此外,8, 4 MPa围压下时,离散元模拟水合物的弹性特性与Hyodo等^[11]室内试验的结果符合较好,而1.5 MPa围压时,离散元模拟获得的水合物弹性模量值偏小,可见离散元模拟获得的水合物的弹性特性较室内试验情况对围压更加敏感。

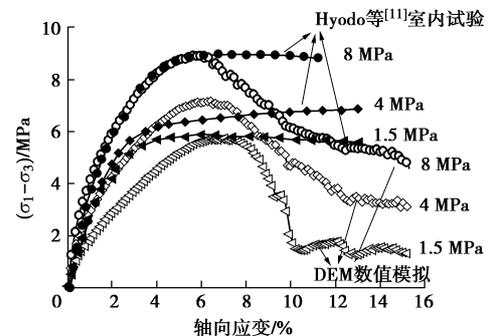


图9 -30°C 不同围压下的应力应变关系

Fig. 9 Relationship between stress and strain under different confining pressures at -30°C

4.2 宏微观力学特性

图10给出了 -30°C 时,3种围压(1.5, 4, 8 MPa)

下甲烷水合物的体积变化规律。由图可知, 甲烷水合物在发生剪胀前均存在一个初始的体积收缩阶段, 且剪胀特性随着围压的减小而呈现增强趋势。

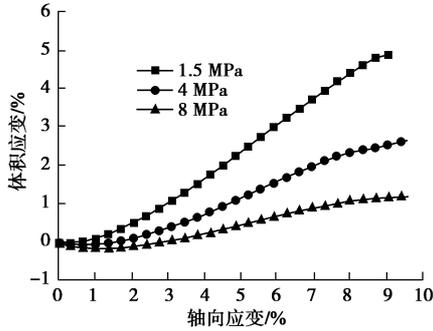


图 10 -30°C 不同围压下的体变关系

Fig. 10 Relationship between volumetric strain and axial strain under different confining pressures at -30°C

现针对 8 MPa 围压下的甲烷水合物试样, 从接触方向结构和残余胶结率这两个方面来分析其微观力学特性, 以研究宏微观力学特性间的相互联系。

颗粒接触点有 2 个接触方向, n 和 $-n$ 分别为单位接触方向矢量, 如图 11 所示, 用 φ 和 θ 定义 n 。二阶接触组构张量定义如下^[26]:

$$F_{ij} = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} \\ F_{21} & F_{22} & F_{23} \\ F_{31} & F_{32} & F_{33} \end{bmatrix} = \frac{1}{2N} \cdot \begin{bmatrix} \sum \sin^2 \theta \cos^2 \varphi & \sum \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \sum \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \\ \sum \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi & \sum \sin^2 \theta \sin^2 \varphi & \sum \sin \theta \cos \theta \sin \varphi \\ \sum \sin \theta \cos \theta \cos \varphi & \sum \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & \sum \cos^2 \theta \end{bmatrix} \quad (10)$$

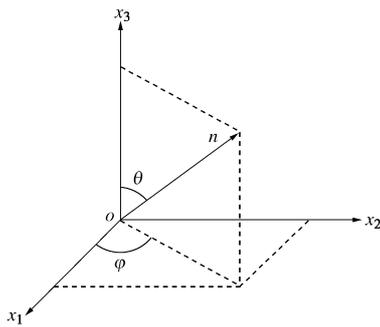


图 11 n 向量的表示

Fig. 11 Polar coordinates φ and θ to define n

当主对角线的 F_{11} , F_{22} 和 F_{33} 相等时代表接触方向在空间分布各向同性; 某一值大, 表示接触方向倾向于该方向分布。图 12 给出 8 MPa 围压时不同轴向应变值对应的接触方向组构分布图。随着竖向应力的增大会使颗粒间接触方向朝竖直方向偏转。

定义 Δ_c 为接触各向异性增强系数, 根据式 (11)

计算获得。图 13 给出了 8 MPa 围压时, 随着轴向应变增大, 接触各向异性增强系数 Δ_c 的变化规律为

$$\Delta_c = F_{11} - \frac{F_{22} + F_{33}}{2} \quad (11)$$

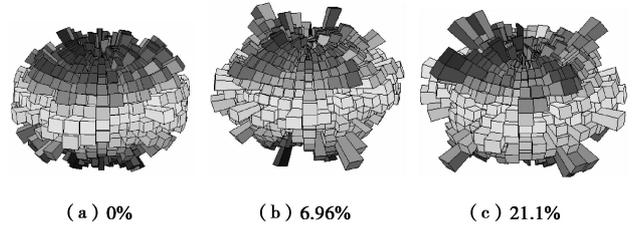


图 12 8 MPa 围压时不同轴向应变值对应的接触方向组构分布图

Fig. 12 Distribution of contact directions at different axial strains at confining pressure of 8 MPa

由图 13 可知, 观察到明显的初始各向异性, 主要是因为初始试样为孔隙比 0.82 的松散试样。图 13 中, 随着轴向应变的增大, 接触各向异性增强系数 Δ_c 表现为软化现象, 与图 9 所示 8 MPa 围压时的应力应变关系图相似。但是, 接触各向异性增强系数 Δ_c 的变化规律与应力应变关系并非同步, 即最大偏应力所对应的轴向应变为 5.76%, 而峰值 Δ_c 所对应的轴向应变变为 6.96%。

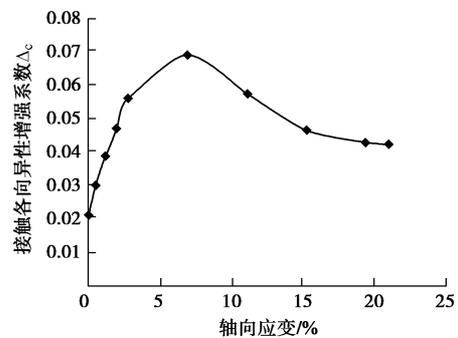


图 13 8 MPa 围压时接触各向异性增强系数 Δ_c 的变化规律

Fig. 13 Evolution of contact anisotropy intensity at confining pressure of 8 MPa

为描述在三轴压缩试验过程中颗粒间胶结数目的变化情况, 定义参数颗粒间残余胶结率, 即不同时刻下胶结数目与初始胶结数目的比值。如图 14 所示, 给出了 8 MPa 围压时颗粒间残余胶结率的变化规律。由图可知, 试样固结结束后, 约 10% 的胶结破坏; 此后, 随着轴向应变的增大, 颗粒间胶结残余率呈微弱的减小趋势, 当轴向应变增大到 5.5% 时, 颗粒间胶结残余率随着轴向应变的发展而迅速降低, 最终达到 0.38, 表明试样逐步破坏。而此时的轴向应变正好与图 9 中最大偏应力值所对应的轴向应变相符合。

离散元模拟中, 平行胶结模型中的胶结作用具有弹脆性特性, 当由式 (3)、(4) 计算得到的 $\bar{\sigma}^{\max}$, $\bar{\tau}^{\max}$ 满足 $\bar{\sigma}_{\max} \geq \bar{\sigma}_c$, $\bar{\tau}^{\max} \geq \bar{\tau}_c$ 两者之一时胶结破坏。现将图 9 中 8 MPa 围压的应力应变关系与图 14 此围压下颗粒间残余胶结率的变化规律画在同一图中, 如图 15 所示。由图 15 可以看出, 应力应变关系峰值过后的软化现象, 正是颗粒间胶结迅速破坏的过程。颗粒间的胶结破坏后, 颗粒间的接触为最简单的线性接触, 即只有法向和切向两个方向的接触, 粒间只有法向和切向作用力。此时, 粒间抗剪强度服从摩擦定律, 且未考虑其抗转动能力, 故而宏观力学强度特性明显降低; 而实际中, 粒间胶结破坏后, 颗粒接触面并不光滑, 颗粒表面的粗糙度、颗粒间的相互咬合作用都会起到抵抗外界压力的作用, 故而其强度未发生明显的降低。此外, DEM 模拟中材料的微观结构与真实水合物材料微观结构不同。DEM 模拟中, 采用胶结模型, 将颗粒通过胶结作用连接在一起, 微观结构的孔隙率低于真实材料的孔隙率, 故应力应变关系中反映出密实试样的软化现象, 而室内试验中, 孔隙率较大, 应力应变关系呈现出了硬化现象。

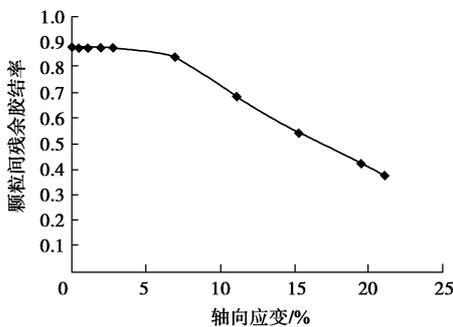


图 14 8 MPa 围压时颗粒间残余胶结率的变化规律
Fig. 14 Evolution of percentage of intact bonds at confining pressure of 8 MPa

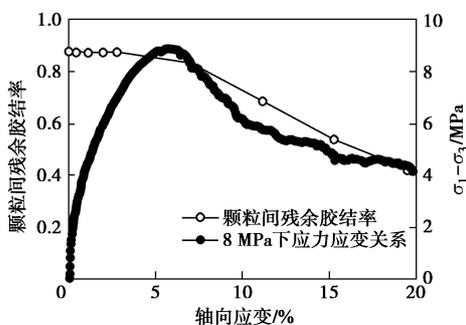


图 15 应力应变峰值过后软化现象解释图
Fig. 15 Elucidative figure of softening phenomenon after peak strength in stress-strain behavior

将纯水合物视为大量颗粒相互胶结的集合体填充

到土颗粒中, 水合物团粒的破碎是由峰值强度控制的, 而离散元模拟可以较好地反映水合物的宏观特性中的峰值强度值。

4.3 与 Nabeshima 等^[27]试验结果对比

文中一套平行胶结模型微观胶结参数的确定方法, 同样适用于模拟其他学者的室内纯水合物试验。

需要说明的是, 水合物的强度特性与所处温度和围压环境密切相关; 当温压环境改变时, 水合物的力学特性会显著改变。文中在一定温度 (-30℃), 根据 3 种围压 (1.5, 4, 8 MPa) 下的应力应变关系, 获取该温度下水合物的内摩擦角及黏聚力值。进而, 根据室内试验结果进行参数反演确定了微观胶结强度与内摩擦角和黏聚力间的关系, 即 $\varphi = 0.20\bar{\sigma} + 7.38$, $c = 0.05\bar{\sigma} + 1.10$ 。故在与 Nabeshima 等^[27]进行的室内甲烷水合物试验对比时, 应尽可能选择同一温度下 (-30℃) 的试验数据进行。

首先, 根据图 16, -30℃ 下, 3 种围压 (2, 3, 6 MPa) 的压缩强度值, 拟合破坏包线方程为 $\tau_f = 0.23\sigma + 2.36$ 。由此可知室内试验中水合物的内摩擦角为 13.3°, 黏聚力为 2.36 MPa。由微观胶结强度与内摩擦角和黏聚力间的关系 ($\varphi = 0.20\bar{\sigma} + 7.38$, $c = 0.05\bar{\sigma} + 1.10$) 知, 要获得与室内试验相符合的内摩擦角和黏聚力, 此时的微观胶结强度 $\bar{\sigma}_c$ 应该在 (20 MPa, 30 MPa) 范围之间。而刚度参数在 (1×10^{11} N/m³, 1×10^{12} N/m³) 范围内选择。

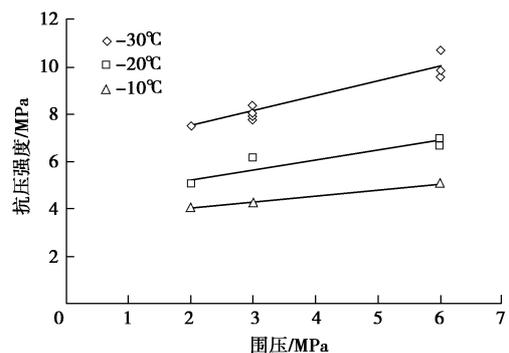


图 16 Nabeshima 等^[27]甲烷水合物三轴压缩试验
Fig. 16 Triaxial compressional data of methane hydrate conducted by Nabeshima et al^[27]

其次, 根据确定的微观胶结参数, 采用离散元进行三轴压缩试验。当平行胶结模型的刚度和强度参数分别为 $\bar{k}^n = 4.5 \times 10^{11}$ N/m³、 $\bar{k}^s = 3 \times 10^{11}$ N/m³、 $\bar{\sigma}_c = \bar{\tau}_c = 26$ MPa 时, DEM 模拟获得的应力应变关系与室内试验结果对比如图 17 所示, 反演获得的胶结强度参数能较好地反映 Nabeshima 等^[27]的室内试验水合物宏观峰值强度特性。

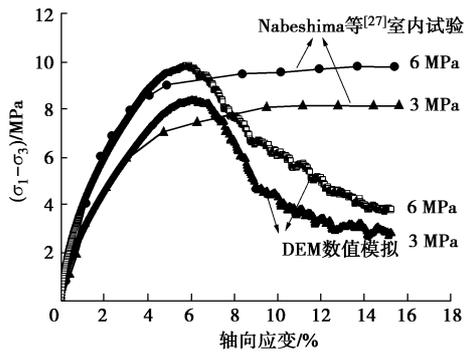


图 17 -30°C 不同围压下的应力应变关系

Fig. 17 Relationship between stress and strain under different confining pressures at -30°C

5 结 语

对于含填充型水合物的砂性能能源土, 可将其视为特殊的散粒体材料, 具有明显的非连续特征。由于实际粒间填充水合物颗粒形状各不相同且在受力过程中可破碎, 因此在离散元模拟填充型水合物的能源土的力学特性时, 有必要先探索模拟水合物的方法。在离散元中若采用团粒(胶结成团的颗粒组)模拟填充水合物颗粒则需合理确定团粒内颗粒间胶结模型参数。

基于已有室内纯水合物三轴试验资料, 通过对离散元颗粒间摩擦系数和平行胶结模型的微观参数(刚度参数和强度参数)进行反演, 确定与室内试验强度特性相符合的微观胶结强度值, 得到了 -30°C 不同围压条件下的离散元模型参数, 从而实现纯水合物宏观强度特性的离散元模拟。

甲烷水合物在发生剪胀前均存在一个初始的体积收缩阶段, 且剪胀特性随着围压的减小而呈现增强趋势。通过微观变量颗粒接触方向组构的分布图可知, 随着轴向应变增大, 颗粒间接触主方向朝垂直方向偏转, 表现出明显的各向异性特性。随着轴向应变的增大, 颗粒间胶结残余率变小, 表明试样逐步破坏。

下一步工作是进行大量温压条件下的参数反演, 得到微观胶结参数与温压之间的具体关系, 同时进行填充型水合物能源土的宏观力学特性的模拟。

参考文献:

[1] BIRCHWOOD R, DAI J, SHELANDER D, et al. Developments in gas hydrates[J]. *Oilfield Review*, 2010, **22**(1): 18 - 33.

[2] KVENVOLDEN K A, LORENSON T D. The global occurrence of natural gas hydrate[M]// *Natural Gas Hydrates: Occurrence, Distribution, and Detection*. Washington: American Geophysical Union, 2001.

[3] BRUGADA J, CHENG Y P, SOGA K, et al. Discrete element modelling of geomechanical behaviour of methane hydrate soils with pore-filling hydrate distribution[J]. *Granular Matter*, 2010, **12**(5): 517 - 525.

[4] HACISALIHOGU B, DEMIRBAS A H, HACISALIHOGU S. Hydrogen from gas hydrate and hydrogen sulfide in the black sea[J]. *Energy Education Science and Technology*, 2008, **21**(1/2): 108.

[5] Committee on Assessment of the Department of Energy's Methane Hydrate Research and Development Program: Evaluating Methane Hydrate as a Future Energy Resource. Committee on Earth Resources. Board on Earth Sciences and Resources. Division on Earth and Life Studies. National Research Council of the National Academies. Realizing the energy potential of methane hydrate for the United States[R]. Washington: the National Academies Press, 2010.

[6] NIXON M F, GROZIC J L H. Submarine slope failure due to hydrate dissociation: a preliminary quantification[J]. *Canadian Geotechnical Journal*, 2007, **44**(3): 314 - 325.

[7] SOGA K, LEE S L, NG M Y A, et al. Characterisation and engineering properties of methane hydrate soils[J]. *Characterisation and Engineering Properties of Natural Soils*, 2007, **3**: 2591 - 642.

[8] WAITE W F, SANTAMARINA J C, CORTES D D, et al. Physical properties of hydrate-bearing sediments[J]. *Reviews of Geophysics*, 2009, **47**(4): RG4003.

[9] UCHIDA S, SOGA K, YAMAMOTO K. Critical state soil constitutive model for methane hydrate soil[J]. *Journal of Geophysical Research*, 2012, **117**(B3): B03209.

[10] WAITE W F, WINTERS W J, MASON D H. Methane hydrate formation in partially water-saturated Ottawa sand[J]. *American Mineralogist*, 2004, **89**(8/9): 1202 - 1207.

[11] HYODO M, NAKATA Y, YOSHIMOTO N, et al. Basic research on the mechanical behavior of methane hydrate-sediments mixture[J]. *Japanese Geotechnical Society*, 2005, **45**(1): 75 - 85.

[12] WINTERS W J, PECHER I A, WAITE W F, et al. Physical properties and rock physics models of sediment containing natural and laboratory-formed methane gas hydrate[J]. *American Mineralogist*, 2004, **89**(8/9): 1221 - 1227.

[13] MIYAZAKI K, MASUI A, SAKAMOTO Y, et al. Triaxial Compressive properties of artificial methane-hydrate-bearing sediment[J]. *Journal of Geophysical Research*, 2011, **116**, B06102.

- [14] 张旭辉, 王淑云, 李清平, 等. 天然气水合物沉积物力学性质试验研究[J]. 岩土力学, 2010, **31**(10): 3069 - 3074. (ZHANG Xu-hui, WANG Shu-yun, LI Qing-ping, et al. Experimental study of mechanical properties of gas hydrate deposits[J]. Rock and Soil Mechanics, 2010, **31**(10): 3069 - 3074. (in Chinese))
- [15] 张旭辉, 王淑云, 李清平, 等. 天然气水合物沉积物力学性质的试验研究[J]. 岩土力学, 2010, **31**(10): 3069 - 3074. (ZHANG Xu-hui, WANG Shu-yun, LI Qing-ping, et al. Experimental study of mechanical properties of gas hydrate deposits[J]. Rock and Soil Mechanics, 2010, **31**(10): 3069 - 3074. (in Chinese))
- [16] 颜荣涛, 韦昌富, 魏厚振, 等. 水合物形成对含水合物砂土强度影响[J]. 岩土工程学报. 2012, **34**(7): 1234 - 1240. (YAN Rong-tao, WEI Chang-fu, WEI Hou-zhen, et al. Effect of hydrate formation on mechanical strength of hydrate-bearing sand[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2012, **34**(7): 1234 - 1240. (in Chinese))
- [17] CUNDALL P A, STRACK O D L. The discrete numerical model for granular assemblies[J]. Géotechnique, 1979, **29**(1): 47 - 65.
- [18] JIANG M J, SUN Y G, YANG Q J. A simple distinct element modeling of the mechanical behavior of methane hydrate-bearing sediments in deep seabed[J]. Granular Matter, 2013, **15**(2): 209 - 220.
- [19] 蒋明镜, 肖俞, 朱方园. 深海能源土宏观力学性质离散元数值模拟分析[J]. 岩土工程学报, 2013, **35**(1): 157 - 163. (JIANG Ming-jing, XIAO Yu, ZHU Fang-yuan. Numerical simulation of macro-mechanical properties of deep-sea methane hydrate bearing soils by DEM[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2013, **35**(1): 157 - 163. (in Chinese))
- [20] SONG Y C, YU F, LI Y H, et al. Mechanical property of artificial methane hydrate under triaxial compression[J]. Journal of Natural Gas Chemistry, 2010, **19**: 246 - 50.
- [21] YU F, SONG Y C, LIU W G, et al. Analyses of stress strain behavior and constitutive model of artificial methane hydrate[J]. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2011, **77**(2): 183 - 188.
- [22] Itasca Consulting Group Inc. PFC3D (Particle Flow Code in 3 Dimensions)[M]. Version 3.0. Minneapolis, MN: ICG; 2002.
- [23] POTYONDY D, CUNDALL P. A bonded-particle model for rock[J]. International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences, 2004, **41**(8): 1329 - 1364.
- [24] WANG J, YAN H. DEM analysis of energy dissipation in crushable soils[J]. Soils and Foundations, 2012, **52**(4): 644 - 657.
- [25] JIANG M J, KONRAD J M, LEROUEIL S. An efficient technique for generating homogeneous specimens for DEM studies[J]. Computers and Geotechnics, 2003, **30**(7): 579 - 597.
- [26] ODA M, IWASHITA K. Mechanics of granular materials[M]. Netherlands: A A Balkema, 1999: 1 - 80.
- [27] NABESHIMA Y, TAKAI Y, KOMAI T. Compressive strength and density of methane hydrate[C]// Proceedings of the Sixth ISOPE Ocean Mining Symposium. Changsha, 2005.