

毛细滞回内变量模型的高效数值积分方法*

李文涛, 韦昌富, 马田田

(中国科学院 武汉岩土力学研究所 岩土力学与工程国家重点实验室,武汉 430071)

摘要: 毛细滞回内变量模型是基于热动力学基本原理推导出来的土水特征本构模型,能够有效地描述干湿循环情况下非饱和土中的毛细滞回现象.研究了该模型的形式特点和数值积分方法,就经典的 Euler 法、4 阶 Runge-Kutta 法和 4 阶 Adams-Bashforth 法的积分效果进行了对比.计算结果表明,Euler 法精度很低,累计误差较大;4 阶 Adams-Bashforth 法精度最高,且运算效率高于同阶的 Runge-Kutta 法,适合对该模型进行求解和参数标定.将基于 Adams-Bashforth 法的子程序集成到有限元程序中,两相渗流模拟结果的精度有了较大提高.

关键词: 毛细滞回; 内变量; 数值积分; 两相流; 非饱和土

中图分类号: TU411; O348 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2013.08.010

引 言

非饱和土中基质吸力与含水率(或饱和度)之间的关系称为土水特征关系.由于孔径分布的不均匀性以及脱湿吸湿过程中孔隙的连通性和固液接触角的改变^[1]等原因,它对水力路径的变化表现出强烈的依赖性.在降雨入渗、蒸发和地下水位变化等情况下,伴随着含水量的增减,非饱和土中基质吸力与含水率不再是一一对应的关系,即出现所谓的毛细滞回现象.这对非饱和土的渗流、溶质迁移、变形及强度特性都会产生重要影响.

在过去的几十年中,毛细滞回现象越来越受到各国学者的重视,已有多种数学模型被相继提出,如经验模型^[2]、区域模型^[3]和理性外推模型^[4]等.尽管这些模型在不同程度上已被应用于模拟非饱和土的两相渗流问题,但它们都不是基于热动力学基本原理推导出来的,因此均带有一定的经验性.

Wei 和 Dewoolkar^[5]基于热动力学原理和多孔介质理论,将毛细滞回现象与非饱和土中孔隙水能量的微观耗散机制联系起来,建立了一个能够有效地描述毛细滞回效应的内变量模型.在主边界线已经给定的条件下,仅需一个参数,该模型就可以描述和预测所有的高阶扫描线,具有很强的适用性.然而,在数学形式上该模型是一个较复杂的率相关模型,难以直接求得解析解,必须采用数值方法进行积分.因此,发展精确高效的数值分析方法对该模型的广泛应用

* 收稿日期: 2013-05-20; 修订日期: 2013-06-05

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11072255); 广西自然科学基金资助项目(2011GXNSFE018004)

作者简介: 李文涛(1989—),男,山东青岛人,博士生(E-mail:lwtdn@sina.com);
韦昌富(1965—),男,广西南明人,研究员,博士生导师(通讯作者.E-mail:cfwei@whrsm.ac.cn).

具有重要的意义。

针对该模型基于 Euler 法编写的积分程序已被嵌入到 U-DYSAC2 有限元程序中,并对干湿循环变化条件下土质边坡渗流过程进行了数值分析^[6],验证了在非饱和土两相流问题中考虑毛细滞回效应的重要性。观察计算结果发现,饱和排水阶段考虑毛细滞回效应的模拟结果明显偏离了真实的主脱湿线。因此,有必要对常用数值积分算法对毛细滞回内变量模型的适用性进行探讨。

本文首先介绍了毛细滞回内变量模型的数学特点,然后对常用的单步法(以 Euler 法、4 阶 Runge-Kutta 法为代表)和多步法(以 4 阶 Adams-Bashforth 法为代表)的积分效果进行了对比分析。最后根据分析结果,将基于 Adams-Bashforth 法的子程序集成到了 U-DYSAC2 有限元程序中,测试其对于干湿循环情况下非饱和土中渗流过程的模拟效果。

1 毛细滞回内变量模型

Wei 和 Dewoolkar^[5]从微观角度详细分析了脱湿-吸湿情况下孔隙流体接触角的变化过程,结合多孔介质理论提出了基于热力学基本原理的毛细滞回内变量模型的本构框架。该模型将毛细滞回现象看作是系统内部的能量耗散过程,并采用内变量理论进行描述。该模型认为,非饱和土中孔隙流体的体积含水率的变化可以假设为可逆和不可逆两部分。模型将不可逆部分视为内变量,通过边界面塑性理论,建立起内变量本构方程。模型预测结果和试验结果的对比表明,该模型可以较好地模拟各种非饱和土的毛细滞回效应。目前,该内变量模型的理论框架已被许多学者采纳,用于进一步发展考虑水力耦合作用的非饱和土弹塑性本构模型^[7-8]。

图 1 为毛细滞回内变量模型的示意图。在该模型中,体积含水率的演化过程可描述为

$$\dot{P}_c = -K_p(\theta, P_c, \hat{n})\dot{\theta}, \quad (1)$$

$\dot{\theta}$ 和 \dot{P}_c 分别为体积含水率变化速率和基质吸力变化速率, $-K_p$ 可视为 θ - P_c 平面内高阶扫描线 (Q_{SC}) 的斜率, \hat{n} 为水力路径方向,脱湿和吸湿时分别取 1 和 -1。

设主脱湿线 (Q_{MDC}) 和主吸湿线 (Q_{MWC}) 分别由函数 $P_c = \kappa_d(\theta)$ 和 $P_c = \kappa_w(\theta)$ 表示,类比 Dafalias^[9]提出的边界面塑性理论,将其作为计算的边界,得到 K_p 的具体表达式为

$$K_p(\theta, P_c, \hat{n}) = \bar{K}_p(\theta, \hat{n}) + \frac{c |P_c - \bar{P}_c(\theta, \hat{n})|}{r(\theta) - |P_c - \bar{P}_c(\theta, \hat{n})|}, \quad (2)$$

式中, c 为描述扫描线特征的参数(以下简称为滞回参数); $r(\theta) = \kappa_w(\theta) - \kappa_d(\theta)$ 为含水率为 θ 时两条主边界之间的基质吸力差;函数 $\bar{K}_p(\theta, \hat{n})$ 和 $\bar{P}_c(\theta, \hat{n})$ 由以下方程给出:

a) 对于脱湿情况 ($\hat{n} = 1$)

$$\bar{P}_c(\theta, 1) = \kappa_d(\theta), \quad \bar{K}_p(\theta, 1) = \frac{d\kappa_d(\theta)}{d\theta}; \quad (3a)$$

b) 对于吸湿情况 ($\hat{n} = -1$)

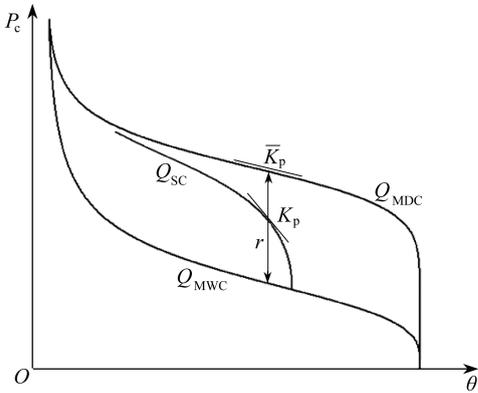


图 1 毛细滞回内变量模型图示

Fig. 1 Internal variable model of capillary hysteresis

$$\bar{P}_c(\theta, -1) = \kappa_w(\theta), \bar{K}_p(\theta, -1) = \frac{d\kappa_w(\theta)}{d\theta}. \quad (3b)$$

从式(1)可以看出,基质吸力变化率 \dot{P}_c 和体积含水率变化率 $\dot{\theta}$ 之间的关系除了与 P_c 和 θ 有关之外,还取决于含水率的变化路径。对于给定的初值和任意含水率的变化路径,需要利用数值方法对式(1)进行积分来求得 P_c 和 θ 之间的关系。在滞回圈主边界线(Q_{MDC} 和 Q_{MWC})已知的条件下,上述模型仅需一个滞回参数 c 即可得到主滞回圈内任意基质吸力(或含水率)循环变化的扫描曲线,而参数 c 的标定需要利用一条扫描线或一个扫描点,通过合适的数值方法试算完成。

2 模型特点及数值积分方法

从形式上看,毛细滞回内变量模型属于率相关模型,核心方程(1)是较为复杂的一阶常微分方程,其主边界线函数由土水特征曲线(soil water characteristic curve, SWCC)的经验公式或插值函数构成,且吸湿-脱湿过程即含水率变化路径具有任意性,因此,难以直接求得解析解。同时,模型中滞回参数 c 没有理论的表达式,需要利用试验数据中的任意一条扫描线进行标定,这也对高精度的数值积分方法提出了要求。此外,毛细滞回模型常常被嵌入到模拟多孔介质非饱和渗流的有限元、有限差分等大型程序中反复调用,为保证求解精度并兼顾程序效率,发展精确高效的数值积分方法是十分必要的。

当初始值位于主边界上时,结合方程(2)和方程(3),模型在理论上退化为

$$\dot{P}_c = -\bar{K}_p(\theta, \hat{n})\dot{\theta}, \quad (4)$$

即主边界线函数的微分形式。因此,当初始值位于主脱湿边界上时,运用方程(3a)沿着脱湿方向进行积分,得到的含水率和基质吸力仍然应该位于主脱湿边界上。同理,当初始值位于主吸湿边界上时,运用方程(3b)沿着吸湿方向进行积分,得到的含水率和基质吸力仍然应该位于主吸湿边界上。可以据此来初步验证数值积分方法的有效性。

经观察发现,对主脱湿和主吸湿边界进行积分时,一旦发生偏离,式(2)的第2项具有明显的误差放大效应,且 c 值越大放大效应越强。同时,为防止累积的舍入误差过大,应避免采用过小的求解步长。另外,在接近饱和处进行滞回循环时,计算结果有出现溢出主边界情况的可能性,由于不同类型非饱和土的基质吸力的变化范围差别很大(几 kPa 至几百 kPa)以及主边界线模型选择的任意性,这就需要根据实际情况进行相应的数值修正^[10]。

常微分方程初值问题的数值解法^[11]可分为显式方法和隐式方法,隐式方法通常需要迭代求解,计算量较大,所以在此优先尝试显式方法求解。由于非饱和土两相流模拟中通常以基质吸力作为自变量,因此,在积分算法的编程实现上仍采用这一选择,并相应地将含水率作为待求解变量。

Euler 法是解决常微分方程数值积分的最基本的一类显式方法,形式简单,易于编程。将积分区间 $[P_c^a, P_c^b]$ 划分为 m 等份, $P_c^1, P_c^2, \dots, P_c^m$ 为等分点,相应的斜率值以 $K_p^n(\theta, P_c, \hat{n})$ 表示,以 h 为积分步长,则毛细滞回内变量模型的具体积分形式可表示为

$$\theta^{n+1} = \theta^n - \frac{1}{K_p^n(\theta, P_c, \hat{n})} h. \quad (5)$$

陈盼等^[6]在多孔介质两相流模拟中运用该形式对模型进行积分,但并未给出误差分析。观察计算结果(文献[6]图4(b))发现,饱和和排水阶段考虑毛细滞回效应的模拟结果与基于实际主脱湿线的模拟结果有较大偏差,在该模型中采用 Euler 法进行积分的有效性需要进一步

地考察。

Runge-Kutta 法是基于 Taylor 展开形成的单步方法,4 阶显式 Runge-Kutta 法由于精度高且是自起动的,计算过程稳定,易于调节步长,因此成为了计算机数学库中的常用方法,将其应用到该模型中,具体形式为

$$\theta^{n+1} = \theta^n + \frac{h}{2}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (6)$$

其中

$$k_1 = -\frac{1}{K_p^n(\theta, P_c, \hat{n})}, k_2 = -\frac{1}{K_p^n(\theta + hk_1/2, P_c + h/2, \hat{n})},$$

$$k_3 = -\frac{1}{K_p^n(\theta + hk_2/2, P_c + h/2, \hat{n})}, k_4 = -\frac{1}{K_p^n(\theta + hk_3, P_c + h, \hat{n})}.$$

该方法的不足之处是计算量较大,每一步需 4 次计算积分函数的值。当 K_p 的光滑性较差时,计算精度可能不如低阶方法。

相比之下,Adams-Bashforth 法等多步法利用前面几步得到的关于积分函数的信息来构造解在新的节点上的近似值,通常每步计算量较少,具有较高的精度和求解效率。不过,多步法起始步仍需要通过自起动的方法来计算,一定程度上增加了程序的复杂性。4 阶 Adams-Bashforth 法具体形式为

$$\theta^{n+4} = \theta^{n+3} - \frac{h}{24} \left[\frac{55}{K_p^{n+3}(\theta, P_c, \hat{n})} - \frac{59}{K_p^{n+2}(\theta, P_c, \hat{n})} + \frac{37}{K_p^{n+1}(\theta, P_c, \hat{n})} - \frac{9}{K_p^n(\theta, P_c, \hat{n})} \right]. \quad (7)$$

本文将依次采用 Euler 法、4 阶 Runge-Kutta 法和 4 阶 Adams-Bashforth 法对毛细滞回内变量模型进行积分,然后就计算精度和求解效率进行对比分析。其中,4 阶 Adams-Bashforth 法的起始步由 4 阶 Runge-Kutta 法计算得到。

3 数值试验

3.1 模型参数

采用具有代表性的 Fontainebleau 砂进行数值试验。Hoa 等^[12](1977)曾对其进行过详细的脱湿-吸湿循环试验,给出了完整的试验数据。试验结果表明此类砂土的土水特征关系具有十分明显的毛细滞回效应。

主边界线描述采用 Feng 和 Fredlund^[13]提出的经验公式

$$P_c = b \left(\frac{\theta_{\text{sat}} - \theta}{\theta - \theta_{\text{irr}}} \right)^{1/a}, \quad (8)$$

式中, θ_{sat} 为饱和含水量, θ_{irr} 为残余含水量, a 和 b 为经验系数。陈盼等^[6]对公式中的参数进行了拟合,并利用 Euler 法由实测的一阶扫描线数据校准得到了滞回参数 c 的取值。具体的材料参数如表 1。

表 1 Fontainebleau 砂的模型参数

Table 1 Model parameters of Fontainebleau sand

parameter	main wetting curve				main drying curve				hysteresis c / Pa
	θ_{sat}	θ_{irr}	a	b / Pa	θ_{sat}	θ_{irr}	a	b / Pa	
value	0.340	0.040	3.595	2 156	0.340	0.040	7.460	3 909	9 810

需要说明的是,因为采用 Euler 法对模型参数进行校准,参数 c 的取值可能与真实值稍微

有所差异,但这并不会显著影响对毛细滞回模型求解方法有效性的研究。

3.2 主边界线积分测试

在 $P_c-\theta$ 平面内,任取主脱湿边界线上的一点(2 000 Pa,0.338 0)作为初值,进行脱湿路径测试,积分至 $P_c = 5\ 000$ Pa;任取主吸湿边界线上的一点(5 000 Pa,0.053 9)作为初值,进行吸湿路径测试,积分至 $P_c = 2\ 000$ Pa。计算过程中,Euler 法采用 1 Pa 和 10 Pa 两种步长,4 阶 Runge-Kutta 法和 4 阶 Adams-Bashforth 法采用 10 Pa 和 30 Pa 两种步长。求解结果见表 2。

从表 2 可以看出,使用 Euler 法求解毛细滞回内变量模型时误差很大,尤其在主脱湿路径测试中,步长为 10 Pa 时可高达 49.2%,即使采用 1 Pa 的小步长误差仍可达 5.71%。而 Runge-Kutta 法和 Adams-Bashforth 法显然要精确很多,尤其是 Adams-Bashforth 法,即使采用了 30 Pa 的较大步长,仍然能很好地逼近真实解。

表 2 不同方法求解结果的对比

Table 2 Comparison of results obtained by different methods

method	step length h / Pa	drying test		wetting test	
		solution θ	relative error ε	solution θ	relative error ε
Euler	1	0.085 9	5.71×10^{-2}	0.210 0	7.73×10^{-3}
	10	0.121 2	4.92×10^{-1}	0.196 7	6.41×10^{-2}
Runge-Kutta	10	0.081 2	3.39×10^{-4}	0.210 1	4.13×10^{-5}
	30	0.081 5	2.98×10^{-3}	0.210 1	3.64×10^{-4}
Adams-Bashforth	10	0.081 2	4.32×10^{-6}	0.210 1	1.37×10^{-7}
	30	0.081 2	7.22×10^{-6}	0.210 1	9.12×10^{-7}

继续对两种高阶方法的运行效率进行测试,等步长条件下分别调用其对主脱湿边界积分 1 000 次,Runge-Kutta 法耗时 0.265 2 s,而 Adams-Bashforth 法耗时为 0.124 8 s,仅为 Runge-Kutta 法的 47%。

从分析结果可以看出,在求解毛细滞回内变量模型时,Adams-Bashforth 法不论在精度和效率上都要优于 Runge-Kutta 法,因此更适合作为模型滞回参数的标定方法以及编写成求解子程序嵌入到有限元、有限差分等大型程序中。

3.3 滞回参数重新校准

由以上分析可知,Euler 法误差较大,利用 Euler 法校准得到的滞回参数 c 是不够准确的,

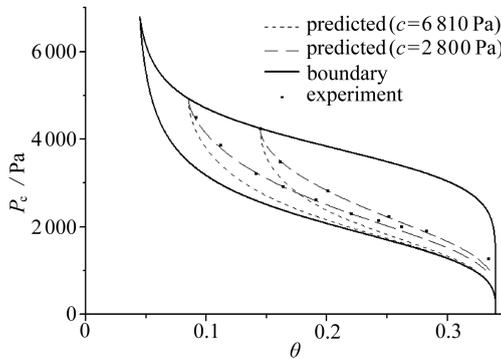


图 2 Adams-Bashforth 法对不同 c 值的计算结果(试验数据引自 Hoa 等的文献[12])

Fig. 2 Model predictions with different values of c by Adams-Bashforth method (experimental data from ref. [12](Hoa *et al.*))

如图 2 所示,由其积分得到的扫描线明显偏离了试验结果.在此任选一条由试验测试得到的扫描线,利用 4 阶 Adams-Bashforth 法重新校准 Fontainebleau 砂的滞回参数.通过试算,得到参数 c 的最佳取值为 2 800 Pa.从图 2 可以看出,模型预测值与试验值吻合得很好,这也进一步证实了毛细滞回内变量模型的有效性.

4 有限元模拟

U-DYSAC2 是可用于准静态和动态多孔介质两相流分析的有限元程序,其有效性已被 Wei^[14]详细论述.将基于 4 阶 Adams-Bashforth 法编写的 Fortran 子程序集成到有限元程序中,取代原有的 Euler 法子程序,重新模拟 Hoa 等^[12]进行的一维圆柱形 Fontainebleau 砂样抽水注水试验.试验砂柱高 1 m,通过改变底部边界流量来产生脱湿和吸湿的循环变化.试验过程中对相应剖面的含水率和孔压的数据进行了采集.具体试验介绍、边界条件和物理力学参数可参见陈盼等的文献[6].Fontainebleau 砂样模型参数见表 1,其中滞回参数 c 采用重新校准得到的值,即 $c = 2\ 800\ \text{Pa}$.

图 3 给出了高度为 60 cm 和 80 cm 处的基质吸力随时间演化的数值模拟结果与实测结果.为便于对比,图中还给出了陈盼等^[6]采用 Euler 法计算的结果和不考虑毛细滞回效应仅采用主脱湿线进行模拟的结果.

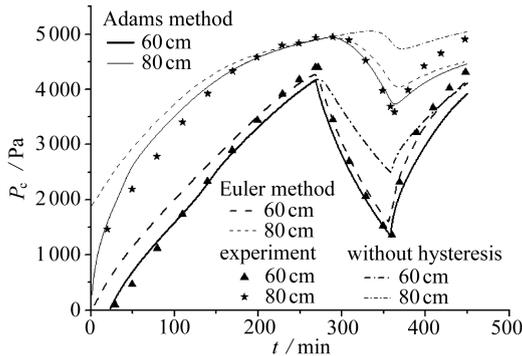


图 3 不同方法模拟结果与试验结果比较(试验数据引自 Hoa 等的文献[12], Euler 法结果引自陈盼等的文献[6])

Fig. 3 Comparison of simulation results by different methods with experimental results(experimental data from ref. [12](Hoa *et al.*), results of Euler method from ref. [6](Chen *et al.*))

在饱和和排水阶段,即前 270 min,砂样沿着主脱湿线进行脱湿.根据前面的分析,毛细滞回模型退化为主脱湿线的微分形式,其模拟结果与仅采用主脱湿线的模拟结果应该是一致的.观察图 3 发现,与不考虑滞回效应的模拟结果对比,Euler 法的结果发生了明显的偏离,而 Adams-Bashforth 法的计算结果则吻合较好,这充分说明了 Adams-Bashforth 法求解毛细滞回内变量模型的精确性.继续分析模型模拟结果与试验数据的吻合程度,首次抽水阶段和注水阶段(前 360 min),模拟结果符合得较好,而在二次抽水阶段(360 min 之后),模拟结果在基质吸力比较高的区域有较大偏离,但仍好于不考虑滞回效应的模拟结果.这一方面说明了考虑毛细滞回效应的重要性,另一方面也为内变量模型的进一步发展改进指出了方向.

5 结 论

基于热动力学基本原理的毛细滞回内变量模型仅需一个滞回参数即可有效描述多孔介质

土水特征的毛细滞回效应,具有很强的适应性,但作为率相关模型以及其主边界函数的复杂性,必须通过数值方法进行积分和校准。

本文研究了该模型的数学形式特点,就经典的 Euler 法、4 阶 Runge-Kutta 法和 4 阶 Adams-Bashforth 法的等数值方法的求解效果进行了对比分析。计算结果表明, Euler 法精度很低,累计误差较大;4 阶 Adams-Bashforth 法精度最高,且运算效率要高于同阶的 Runge-Kutta 法,是对该模型进行数值积分和参数校准的理想方法。将基于 Adams-Bashforth 法的子程序集成到有限元程序 U-DYSAC2 中对砂柱的干湿循环试验进行模拟,计算结果在精度上有了较大提高。

参考文献(References):

- [1] Hillel D. *Fundamentals of Soil Physics*[M]. New York: Academic Press Inc, 1980.
- [2] Huang H C, Tan Y C, Liu C W, Chen C H. A novel hysteresis model in unsaturated soil[J]. *Hydrological Processes*, 2005, **19**(8): 1653-1665.
- [3] Mualem Y A. Conceptual model of hysteresis[J]. *Water Resources Research*, 1974, **10**(3): 514-520.
- [4] Parlange J Y. Capillary hysteresis and the relationship between drying and wetting curves[J]. *Water Resources Research*, 1976, **12**(2): 224-228.
- [5] Wei C F, Dewoolkar M M. Formulation of capillary hysteresis with internal state variables [J]. *Water Resources Research*, 2006, **42**(7): W07405.
- [6] 陈盼,魏厚振,徐炎兵,李幻,韦昌富. 多孔介质中两相流动过程的毛细滞回效应[J]. 岩石力学与工程学报, 2010, **29**(10): 2148-2158. (CHEN Pan, WEI Hou-zhen, XU Yan-bing, LI Huan, WEI Chang-fu. Effect of capillary hysteresis on two-phase flow in porous media[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2010, **29**(10): 2148-2158. (in Chinese))
- [7] Muraleetharan K K, Liu C, Wei C, Kibbey T C G, Chen L. An elastoplastic framework for coupling hydraulic and mechanical behavior of unsaturated soils[J]. *International Journal of Plasticity*, 2009, **25**(3): 473-490.
- [8] Liu C, Muraleetharan K K. Coupled hydro-mechanical elastoplastic constitutive model for unsaturated sands and silts—I: formulation[J]. *Int J Geomech*, 2012, **12**(3): 239-247.
- [9] Dafalias Y F. Bounding surface of plasticity—I: mathematical foundation and hypoplasticity [J]. *J Eng Mech*, 1986, **112**(9): 967-987.
- [10] Vogel T, van Genuchten M T, Cislserova M. Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions [J]. *Advances in Water Resources*, 2000, **24**(2): 133-144.
- [11] 李庆扬,王能超,易大义. 数值分析[M]. 北京:清华大学出版社, 2008. (LI Qing-yang, WANG Neng-chao, YI Da-yi. *Numerical Analysis*[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2008. (in Chinese))
- [12] Hoa N T, Gaudu R, Thirriot C. Influence of the hysteresis effect on transient flows in saturated-unsaturated porous media[J]. *Water Resources Research*, 1977, **13**(6): 992-996.
- [13] Feng M, Fredlund D G. Hysteretic influence associated with thermal conductivity sensor measurements[C]//*Proceedings of the 52nd Canada Geotechnical Conference and Unsaturated Soil Group From Theory to the Practice of Unsaturated Soil Mechanics*. Regina, Saskatchewan, Canada: [s. n.], 1999: 651-657.
- [14] Wei C F. Static and dynamic behavior of multiphase porous media: governing equations and

finite element implementation[D]. PhD Thesis. Norman: University of Oklahoma, 2001.

An Efficient Numerical Integration Method for the Capillary Hysteresis Internal Variable Model

LI Wen-tao, WEI Chang-fu, MA Tian-tian

(*State Key Laboratory of Geomechanics and Geotechnical Engineering,
Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences,
Wuhan 430071, P. R. China*)

Abstract: Derived from thermo dynamic principle, the capillary hysteresis internal variable model is capable of describing the capillary hysteretic phenomena in unsaturated soils. The mathematical characteristics of this model were studied, followed by a numerical experimentation with classical Euler method, fourth-order Runge-Kutta method and fourth-order Adams-Bashforth method. The results show that Euler method has lower accuracy and larger accumulated error, whereas Adams-Bashforth method holds the upper most accuracy and the better efficiency compared with the same order Runge-Kutta method and is suitable for the solution and calibration of the internal variable model. Moreover, Adams-Bashforth method is implemented into the finite element programme, leading to more accurate results in simulation of two-phase flow.

Key words: capillary hysteresis; internal variable; numerical integration; two-phase flow; unsaturated soil