

Numerical Simulation Technology and Application with

Particle Flow Code(PFC5.0)

颗粒流 (PFC5.0) 数值模拟技术及应用

石 崇 张 强 王盛年 编著

中国建筑工业出版社

颗粒流 (PFC5.0) 数值模拟 技术及应用

石 崇 张 强 王盛年 编著

中国建筑工业出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

颗粒流 (PFC5.0) 数值模拟技术及应用/石崇, 张强, 王盛年 编著. —北京: 中国建筑工业出版社, 2018.7

ISBN 978-7-112-22320-6

I. ①颗… II. ①石… ②张… ③王… III. ①颗粒分析-数值模拟-研究 IV. ①TQ172.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2018) 第 123626 号

本书是作者总结多年对颗粒流数值模拟技术的研究, 著写完成的。本书具备专业性、实用性、可读性强的特点。

全书主要内容包括: PFC5.0 的基本特点与界面操作, PFC5.0 基本命令与模型构建技术, 奔向颗粒流高级应用的桥梁: FISH 语言, 伺服机制及数值试验实现技术, 接触模型与参数标定方法研究, 复杂岩土细观特征识别与随机重构技术, 岩体爆破破坏效应颗粒流数值模拟, FLAC3D6.0-PFC3D5.0 耦合滑坡数值模拟研究, 离散元—流体耦合计算与应用等章节。

本书适合广大水利水电、建筑土木、矿山交通等相关专业的读者使用。

* * *

责任编辑: 张伯熙

责任校对: 张颖

颗粒流 (PFC5.0) 数值模拟技术及应用

石崇 张强 王盛年 编著

*

中国建筑工业出版社出版、发行 (北京海淀三里河路9号)

各地新华书店、建筑书店经销

霸州市顺浩图文科技发展有限公司制版

廊坊市海涛印刷有限公司印刷

*

开本: 787×1092 毫米 1/16 印张: 28 $\frac{1}{4}$ 字数: 716 千字

2018年8月第一版 2018年8月第一次印刷

定价: 78.00 元

ISBN 978-7-112-22320-6

(32194)

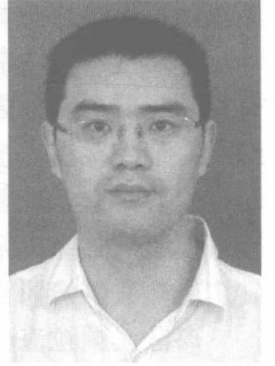
版权所有 翻印必究

如有印装质量问题, 可寄本社退换

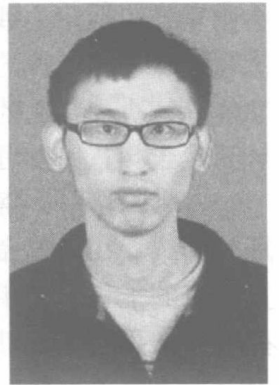
(邮政编码 100037)

著者简介：

石崇，1978 年生于山东沂水，教授，博士生导师。河海大学土木与交通学院岩土所，岩石研究室主任，岩土数值计算研究中心主任，江苏省重大基础设施安全保障协同创新中心成员。2008 年 6 月获河海大学岩土工程专业工学博士学位，2008 年 10 月进入河海大学岩土所工作，从事岩石力学与工程安全、岩土工程中的解析与数值方法、岩石动力学等方面的教学与研究，主持国家重点基础研究发展计划（973 计划）子题 1 项，国家自然科学基金面上项目 1 项，国家自然科学基金青年项目 1 项，江苏省青年基金 1 项，教育部博士点基金 1 项，同时主持和参与了多项重大工程科研课题。发表 EI、SCI、CSCD、ISTP 等检索论文 100 余篇，获授权发明专利 9 项，登记软件著作权 21 项，出版专著 3 部，获 2017 年岩石力学与工程学会自然成果奖一等奖（排名 2），2013 年水力发电科学技术奖特等奖（排名 2）、2010 年大禹水利科学技术进步奖一等奖（排名 2）。



张强，1986 年生于山西怀仁，博士后。2016 年 12 月获河海大学岩土工程专业工学博士学位，2017 年 2 月至今为中国水利水电科学研究院岩土工程研究所在站博士后，主要从事复杂岩土介质多尺度灾变机理与数值模拟等方面的研究工作，主持国家重点研发计划专题 1 项，中国博士后科学基金面上项目 1 项，同时负责和参与多项横向课题。发表 SCI 检索论文 8 篇，获授权发明专利 5 项，登记软件著作权 10 余项，获 2013 年水力发电科学技术奖特等奖（排名 13）。



王盛年，1987 年生于甘肃武威。2016 年获河海大学岩土工程专业工学博士学位，博士期间赴加拿大访学 18 个月。现为南京工业大学交通运输工程学院助理研究员。在 *Landslide*、*Granular Matter* 等国际著名期刊发表 SCI、EI 检索论文十余篇。目前主要从事岩土力学计算理论与数值模拟方法相关研究工作。



前 言

没有任何事物是永恒不变的，“万物皆流，无物常驻”，赫拉克利特（Heraclitus）的名言特别适合岩土材料。砂土、土石混合体、堆石坝、铁路路基，甚至岩石、混凝土等等，本质上均是由散体介质胶结或者架空而成，通过颗粒介质材料承受并传递荷载，即使是岩石、混凝土等强度很高的介质，内部也存在大量的微观裂隙、骨料等细观特征。这些细观特征的存在，加上外部物理环境的变化，导致宏观介质力学特性不变演化变形直至破坏，引起广大学者普遍关注。复杂的问题多种多样，如果只采用固化思维，很容易违背了数值模拟的某些原则，造成计算结果的失真。只有跳出思维的定式，才能洞窥世界的奥妙。做什么事情，都是如此。

离散元颗粒流方法，能够实现数值模型逼近真实材料的力学响应特征，在各种数值模拟方法中显示出巨大的优势，因而广受关注。PFC5.0 软件，充分利用了复杂颗粒、空间裂隙网络几何图形构造方法，是对原有版本软件的巨大提高，优化了计算速度，改进了算法，大大拓展了颗粒流方法在科学研究中的应用。在笔者看来，其可应用范围，小到微观尺度，大可到星系空间，无所不能。

然而学而不思则罔，思而不学则殆，任何软件都只是一个工具，其原理方法规则远比会用重要，运用之妙，存乎于心。学习颗粒流方法的人不外乎分三个层次：初学者重在熟悉命令，了解计算的规则，此为第一个层次，解决“会”的问题；然后能自编程序，拓展功能，解决“精”的问题；最后跳出软件，仰首思索，任何数据、几何图形、问题、方案皆了然于胸，俯首可拾，各种数值方法均可相通，此为数值模拟之第三个境界。

本书的撰写，寄希望用简单的实例教授最基本的原则，因此剔除了颗粒流理论方法方面的介绍。在了解命令的基础上重在明白各种数值模拟技术措施的原理与实现方法，与浩如烟海的工程问题相比，本书所列方法只是冰山一角，如果你希望本书能够完全解决你的问题，却是万万不可能的，求全责备往往希望越大，失望越大，还不如放弃此书。如果能通过本书，了解数值模拟的本质，再嵌入自己的思维，简化问题、解决问题，达到手中无书，心中有术，这才是本书的目的，也是笔者撰写本书最大的期望。

为了令读者快速熟悉颗粒流 PFC5.0 并掌握用其进行数值模拟的技术，本书共分为 9 章：第 1 章 PFC5.0 的基本特点与界面操作，第 2 章 PFC5.0 基本命令与模型构建技术，第 3 章 奔向颗粒流高级应用的桥梁：FISH 语言，第 4 章 伺服机制及数值试验实现技术，第 5 章 接触模型与参数标定方法研究，第 6 章 复杂岩土细观特征识别与随机重构技术，第 7 章 岩体爆破破坏效应颗粒流数值模拟，第 8 章 FLAC3D6.0-PFC3D5.0 耦合滑坡数值模拟研究，第 9 章 离散元—流体耦合计算与应用。读者可根据自己的情况参考各章节内容，如果是初学者则建议按顺序学习，如果已有较好的基础，则可跳过前三章基础环节。

本书由河海大学岩土工程科学研究所石崇统稿撰写、校核，北京水科院张强博士、南京工业大学王盛年博士参与编写。另外课题组研究颗粒离散元理论与应用的研究生李德杰博士、孔洋博士、张玉龙博士、白金州博士，刘苏乐、金成、杨文坤、张成辉、杨俊雄、

张一平、陈晓、郭勇、卢显、王建龙、戴薇、肖锦文、李荣浩等硕士，参与了不同章节的撰写与整理工作，潘亚洲、李佳鸣、苏畅等本科生参加了命令与帮助的翻译工作，谨此致以衷心的感谢！

本书受以下基金课题联合资助：

国家重点基础研究发展计划（973 计划）（2015CB057903）、国家自然科学基金（51679071，51309089）、中国博士后科学基金（2017M620838）、中央高校基本科研业务费专项资金（2017B20614）、江苏省科技计划面上项目（BK20171434）、江苏省重大基础设施安全保障协同创新中心专项资金联合资助。

另外需要说明的是：本书中代码多数是由课题组人员联合编制而成，部分是参考多个“PFC 颗粒流交流 QQ 群”中公开的代码，并在此基础上进行修改、完善、标注而成。限于内容无法一一具名，深感不安，在此对无偿提供基础代码的诸位同仁表示诚挚感谢！即使如此，本书只是笔者对颗粒流方法与数值模拟技术的浅陋之见，由于知识结构、认识水平与工程实践条件的限制，难免出现谬误之处，恳请有关同行及读者批评指正，提出宝贵意见，以便笔者及时修订、更正和完善。联系邮箱：303813500@qq.com。

目 录

第 1 章 PFC5.0 的基本特点与界面操作	1
1.1 岩土工程颗粒流方法应用背景	1
1.2 PFC 方法简介	2
1.3 PFC5.0 软件的新特点	4
1.3.1 PFC5.0 新增选项	5
1.3.2 停止使用的选项	5
1.3.3 PFC4.0 与 5.0 对比	5
1.4 PFC 软件运行界面操作	8
1.4.1 安装与卸载	8
1.4.2 PFC 安装文件夹内容	9
1.4.3 PFC5.0 软件图形界面	10
1.5 PFC5.0 图形属性界面操作	20
1.5.1 绘图选项控制集	20
1.5.2 绘图条目控制集	23
1.6 本章总结	27
第 2 章 PFC5.0 基本命令与模型构建技术	28
2.1 常用的通用命令	28
2.1.1 PFC 命令流编制顺序	28
2.1.2 几个通用命令	29
2.2 PFC5.0 中与几何图形有关的命令	30
2.2.1 Range 定义范围与使用	30
2.2.2 Geometry (几何图形) 的使用	32
2.2.3 离散裂隙网络 DFN 与使用	38
2.3 PFC5.0 颗粒生成方法	51
2.3.1 规则排列颗粒生成方法	51
2.3.2 随机分布颗粒生成方法	53
2.3.3 外部颗粒导入生成法	61
2.3.4 块体颗粒组装模型方法	63
2.4 PFC5.0 中刚性簇 (clump) 生成方法	64
2.4.1 常见刚性簇生成原理	64
2.4.2 刚性簇逐个生成方法	65
2.4.3 基于簇模板随机生成方法	69
2.4.4 柔性簇 cluster 的生成	71
2.4.5 刚性簇 (clump) 与柔性簇 (cluster) 转化方法	74

2.5 PFC5.0 的墙 (wall) 生成方法	79
2.5.1 命令生成方法	79
2.5.2 几何图形导入法	84
2.6 PFC5.0 接触的定义方法	86
2.6.1 PFC 中的接触模型	86
2.6.2 接触模型分配表 (cmat) 法	88
2.6.3 当前接触定义 (contact) 法	89
2.6.4 接触施加实例验证	90
2.7 PFC5.0 信息记录与后处理	101
2.7.1 hist 记录方法	101
2.7.2 result 记录方法	104
2.7.3 measure 记录方法	106
2.7.4 目标轨迹追踪 (trace) 方法	106
2.8 本章小结	107
第3章 奔向颗粒流高级应用的桥梁：FISH 语言	108
3.1 FISH 语言基本规则	108
3.1.1 命令行	108
3.1.2 数据类型	109
3.1.3 函数或变量命名	110
3.1.4 函数：结构、评价和援引	111
3.1.5 算术：表示及类型转化	114
3.1.6 重新定义 FISH 函数	114
3.1.7 函数执行	114
3.1.8 内联 FISH 和 FISH 片段	117
3.1.9 FISH 回调事件	117
3.1.10 FISH 错误处理	123
3.2 FISH 声明语句	124
3.2.1 变量声明语句	124
3.2.2 条件控制语句	125
3.2.3 循环控制语句	127
3.2.4 其他语句	130
3.3 FISH 内嵌函数	131
3.3.1 常用命令特性函数	131
3.3.2 离散裂隙网络控制函数	136
3.3.3 片段与几何图形控制函数	140
3.3.4 实体内变量函数	147
3.4 FISH 编程实例	157
3.4.1 利用 FISH 函数实现实体信息的输出	157
3.4.2 利用 FISH 函数生成各种分布随机数	165

3.4.3	利用 FISH 函数将分组颗粒构造为柔性簇	166
3.4.4	FISH 随机生成颗粒簇	168
3.4.5	利用 FISH 计算边坡的动力响应	171
3.5	本章小结	175
第 4 章	伺服机制及数值试验实现技术	176
4.1	颗粒流中的边界伺服机制	176
4.1.1	伺服原理	176
4.1.2	伺服方法	178
4.2	二维与三维压缩试验实现	179
4.2.1	二维压缩试验命令流编制	179
4.2.2	三维真三轴压缩试验命令流编制	186
4.2.3	三维圆柱形假三轴压缩试验命令流编制	194
4.3	二维与三维剪切试验实现	201
4.3.1	二维剪切试验实现	201
4.3.2	三维剪切试验实现	209
4.4	任意几何模型的伺服实现	223
4.4.1	劈裂试验模型与实现	223
4.4.2	任意形状模型的伺服与实现	225
4.5	柔性颗粒膜伺服实现	230
4.6	伺服过程中的几个问题分析	240
4.6.1	时间步选择	240
4.6.2	阻尼设置	241
4.6.3	如何令模型快速满足要求	241
4.7	数值模型状态的检测	243
4.7.1	应变检测	243
4.7.2	应力检测	244
4.7.3	配位数检测	246
4.7.4	颗粒体系压密状态对应力—应变曲线的影响	247
4.8	本章总结	248
第 5 章	接触模型与参数标定方法研究	249
5.1	FishTANK 的使用方法	249
5.1.1	FishTANK 的构成与使用	249
5.1.2	二维平行黏结双轴试验实现实例	251
5.1.3	FishTANK 的用途探讨	255
5.2	FishTANK 标定参数需要设置的参量	255
5.2.1	PFC 材料及共有属性设置	255
5.2.2	线性模型需要设置的参数	257
5.2.3	接触黏结模型需要设置的参数	258
5.2.4	平行黏结模型需要设置的参数	259

5.2.5	节理模型需要设置的参数	260
5.3	接触黏结与平行黏结模型参数标定规律	262
5.3.1	标定参数基本条件	262
5.3.2	平行黏结线性对应快速标定法	263
5.3.3	接触黏结线性对应快速标定法	268
5.3.4	混合模型参数标定法	272
5.4	不同应变率下平行黏结模型参数快速标定	278
5.4.1	试验情况	278
5.4.2	数值模型的构建	278
5.4.3	细观参数对宏观变形与强度的影响	282
5.4.4	应变率随动平行黏结模型	282
5.4.5	数值模拟结果分析	284
5.5	蠕变模型参数标定规律研究	286
5.5.1	基于非连续理论的 Burger's 流变接触模型	286
5.5.2	数值试验若干要点	289
5.5.3	模型数值验证分析	289
5.5.4	模型参数与流变特性关系	295
5.6	本章小结	299
第6章	复杂岩土细观特征识别与随机重构技术	301
6.1	多元混合体介质的数字图像细观特征提取方法	302
6.1.1	基于数字图像人工绘制方法	303
6.1.2	数字图像分析与识别方法	303
6.1.3	基于数字图像颗粒流细观模型构造	306
6.2	二维颗粒细观轮廓随机构造方法	308
6.2.1	基于数值图像分析的二维多边形颗粒描述方法	308
6.2.2	多元混合介质轮廓的随机构成方法	309
6.3	细观颗粒二维傅立叶分析与重构方法	315
6.3.1	细观颗粒傅立叶分析原理	315
6.3.2	颗粒细观特征的傅立叶分析与重构方法	316
6.3.3	傅立叶细观特征统计特性	317
6.3.4	细观特征的随机重构	320
6.3.5	二维傅立叶谱分析与重构结论	321
6.4	三维颗粒细观轮廓识别与随机构造方法	322
6.4.1	颗粒激光扫描三维细观轮廓获取方法	322
6.4.2	基于椭球表面基构造多面体描述三维颗粒	324
6.4.3	基于傅立叶分析的三维颗粒随机重构方法与分析	327
6.4.4	基于球谐函数的三维细观特征刻画与力学特性分析方法	337
6.5	细观特征在 PFC5.0 中的实现与应用	342
6.5.1	用于颗粒分组生成簇	342

6.5.2	用于 clump 模板控制随机颗粒生成	346
6.5.3	用于复杂 wall 的生成	348
6.6	本章总结	352
第7章	岩体爆破破坏效应颗粒流数值模拟	353
7.1	离散元数值模型的建立	353
7.1.1	炸点颗粒膨胀加载法	353
7.1.2	应力波传播的动边界条件	354
7.1.3	宏观—细观岩体力学参数对应模型	355
7.2	岩体爆炸破岩过程机理分析	357
7.3	爆破破岩效应验证探讨	358
7.3.1	药包埋深对爆破效果的影响	359
7.3.2	炮孔压力对爆破效果的影响	359
7.3.3	炸点膨胀比对爆破效果的影响	360
7.4	微差爆破效应验证	361
7.5	问题讨论	372
7.5.1	柱状波的施加方法讨论	372
7.5.2	动力边界条件施加讨论	374
7.6	结论	379
第8章	FLAC3D6.0-PFC3D5.0 耦合滑坡数值模拟研究	380
8.1	连续—非连续耦合原理	380
8.2	FLAC3D6.0-PFC5.0 耦合建模计算实例	383
8.2.1	计算条件	383
8.2.2	命令流编制	384
8.3	计算结果分析	397
8.4	经验总结	402
第9章	离散元—流体耦合计算与应用	404
9.1	流体与颗粒的相互作用方式	404
9.2	PFC5.0 中的流固耦合功能	405
9.2.1	采用 FISH 语言添加额外作用力方法	405
9.2.2	利用 PFC 内置 CFD 模块与外部流体求解器耦合模拟复杂流场	409
9.3	二维水力劈裂 FISH 语言模拟实例	415
9.4	流固耦合算例	432
9.4.1	利用 PFC 自带 CFD 模块实现单向耦合	432
9.4.2	利用达西定律模拟多孔介质流动	435
9.4.3	与其他流体软件耦合	441
9.5	PFC 与流体耦合分析应用探讨	444
	参考文献	445
	后记	449

第 1 章 PFC5.0 的基本特点与界面操作

1.1 岩土工程颗粒流方法应用背景

我国持续发展的基础建设使得工程条件越来越复杂,尤其岩土工程领域内许多研究对象,如堆积体边坡、堆石坝,碎石垫层、砂垫层、抛石路基等,本质上是由散体介质胶结或者架空而成,通过颗粒介质材料承受并传递上部荷载。多数工程涉及的材料种类多样,几何形态多样,力学环境复杂,使得工程上应用材料力学、结构力学、弹性力学、土力学、岩石力学等传统方法难以在数学上获得解析解,而对于大多数问题,由于材料和几何图形的非线性,无法对工程做出系统、全面的理解。在这种背景下,伴随着计算机技术的飞速发展,数值分析方法已经成为大型土木工程求解科学问题不可或缺的分析手段。

目前的数值模拟方法中,主要包括确定性分析和非确定性分析方法两类,而确定性分析又可分为连续介质分析与非连续介质分析方法。其中连续数值分析方法有有限单元法、边界元法、有限差分法等,非连续介质分析方法有块体离散元法、颗粒离散元法、关键块体理论、不连续变形分析(DDA法)等。

由于岩土工程的复杂性,常规的数值模拟方法如有限单元法、有限差分法、块体离散单元法等,在分析大变形及岩土破坏问题时均带有局限性,使得近年来颗粒离散元方法(又称颗粒流方法)在各类工程中获得了大量的尝试与应用。研究者期望利用该方法解决传统的岩土力学理论无法解释的典型力学现象,揭示复杂条件下微、细观介质的累积损伤与破坏机理,形成了当前该方法被高度重视与关注的局面。

几种常见数值模拟方法的优缺点对比见表 1-1。

几种常用的数值模拟方法对比

表 1-1

方法名称	优点	缺点
有限元法	适用于变形介质的分析。①能够对具有复杂地貌、地质的边坡进行计算;②考虑了土体的非线性弹塑性本构关系,以及变形对应力的影响,可与多种方法相结合,发挥出更大的优势,如刚体极限平衡有限元法	不能体现颗粒间的复杂相互作用及高度非线性行为;不能真实刻画散体材料的流动变形特征。有限元对于大变形求解、岩体中不连续面、无限域和应力集中等问题的求解还不理想
块体离散单元法	用于节理岩石的稳定分析,便于处理以所有非线性变形和破坏都集中在节理面上为特征的岩体破坏问题	对连续介质有一定的局限性,对节理面上的法向及切向弹簧刚度参数的确定问题有待解决
快速拉格朗日元法(常用软件 FLAC3D)	能处理大变形问题,模拟岩体沿某一弱面产生的滑动变形,可比较真实地反映实际材料的动态行为。能有效模拟随时间演化的非线性系统的大变形力学过程	采用屈服准则,但求得的是局部单元的屈服破坏情况,而对整体的稳定情况评价力度不足

续表

方法名称	优点	缺点
非连续变形分析法 (DDA)	主要适用于不连续块体系统,可模拟出岩石块体的移动、转动、张开、闭合等全部过程,并据此判断岩体的破坏程度、破坏范围	参数直接影响到计算结果,一般假定岩体为弹性的,塑性、黏性不适用。对软岩、软硬相间的情况处理困难。另外,对静态问题处理过于简单
颗粒流方法 (颗粒离散元法) 软件 (PFC2D/3D)	不受变形量限制,可方便地处理非连续介质力学问题,体现多相介质的不同物理关系,可有效地模拟介质的开裂、分离等非连续现象,可以反映机理、过程、结果	参数标定困难,复杂模型建立困难,力学机理复杂,缺少工程应用验证

1.2 PFC 方法简介

PFC 程序 (Particle Flow Code), 又称为颗粒流方法, 集成了二维 (PFC2D) 和三维 (PFC3D), 是基于通用离散单元模型 (DEM) 框架, 由计算引擎和图形用户界面构成的细观分析软件。

基于 Cundall (1979) 的定义, PFC 是基于离散单元代码的软件, 它允许离散颗粒产生位移和旋转, 随着计算过程可以自动识别新的接触。颗粒球可以组合在一起, 用于处理变形多面体 (多边形) 颗粒的模拟。

PFC 主要用于模拟有限尺寸颗粒的运动和相互作用, 而颗粒是带质量的刚性体, 可以平移和转动。颗粒通过内部惯性力、力矩, 以成对接触力方式产生相互作用, 接触力通过更新内力、力矩产生相互作用。

PFC 模型中每个颗粒可以被表示为一个实体, 它不是一个点质量, 而是一个带有限质量和定义表面的刚性体。PFC 模型由实体 (body)、片 (piece) 和接触 (contact) 组成。实体主要有三种类型: 球、簇和墙。每个实体由一到多个片组成, 如一个球就只有一个片组成, 即其本身。簇和墙的片 (piece) 分别被叫作 pebble 和 facet。接触在片之间是成对出现的, 可以动态地产生和消失。

球在二维里面表现为单位厚度的圆盘, 在三维里表现为球体。簇是 pebble 的集合体, 在二维里是许多单位厚度的圆盘, 在三维里是许多球体。簇模型形成的是刚性体。组成簇的 pebble 可以相互重叠, 簇实体内部没有接触产生, 但可以在不同实体间的片之间形成。

墙 (wall) 是面 (facets) 的集合, facets 在二维里表现为线段, 三维里表现为三角形。由 facet 可以构成任意复杂的空间多边形。

注意: 所有的实体都只能出现在 domain 区域里, 不能超出这个区域。

球和簇的运动遵守牛顿运动定律, 但是墙的运动是用户指定的。因此只有球和簇有质量特性 (质量、中心位置和惯性张量) 和加载条件 (在每个接触上的力和力矩, 源于重力的体积力, 以及外部作用力和力矩)。

颗粒的相互接触是借助相互作用定律, 通过软接触方法实现的。所有变形都只能产生于刚性实体接触, 在两个实体的表面这种力学相互作用表现为一对或者多对接触。接触通

过片邻近的接触识别逻辑创建和删除，因此一个接触相当于在两个片之间提供了一个界面（接口），通过颗粒相互作用定律内力和位移不断更新。这种颗粒相互作用定律就是一个接触模型。

熟悉并区分如下几个术语，有助于快速了解 PFC 方法：

1. domain

domain 表示一个区域，用来进行接触检测判断。在 PFC5.0 中，所有对象都是在给定的 domain 区域内进行。domain 提供了 4 种边界条件类型：stop、destroy、reflect、periodic。

2. bodies 和 pieces

PFC5.0 中存在 3 种 body (ball、wall、clump)，每个 body 由一个或若干个 piece 构成。其中，piece 用来进行接触检测与判断，每个 body 所有 piece 的计算数据都存储于该 body 上，用来进行系统运动方程积分求解计算。

ball 是一个 body 和一个 piece；clump 是许多 pebble 的组合体，一个 pebble 即为 clump 的一个 piece；wall 由一系列 facet 构成，每个 facet 均为 wall 中的一个 piece。

body surface 是由这些 piece 构成，property 就是针对 body surface 而言的。

pieces 接触类型有：ball-ball、ball-facet、ball-pebble、pebble-pebble、pebble-facet。接触类型顺序依次是 ball、pebble、facet。

对于不同接触类型，contact.end1 () 和 contact.end2 () 分别对应于什么，这是研究者必须区分清楚的，对于 end1 的实体必然是 ball 或 pebble，而 end2 则可能是 ball、pebble、wall。

3. wall 和 facet

wall 是由一系列 facet 构成，在 2D 情形下，facet 为线段；在 3D 情形下，facet 为三角形面。每个 facet 具有 2 个或 3 个端点，这些端点统称为 wall 的顶点 (vertex)，可以利用 wall.vertex.list 进行遍历查询。最新 FLAC3D6.0 与 PFC3D5.0 间的耦合也是基于这个进行的。

4. clump 和 pebble

PFC5.0 中把 ball 和 clump 进行了区分，将构成刚性簇的球称为 pebble，因此接触类型中 pebble-pebble 指的是不同刚性簇间的接触，而不包括同一簇内部球体之间的接触。

5. cluster 与 clump

cluster 是指一组 ball 通过特定的设置利用接触相互黏结、密实，表现出簇的特性，但是之间的接触有限，在外力足够条件下颗粒可以破碎，又称为柔性簇。

clump 是指一系列球叠加在一起，无论什么条件，各球 (pebble) 之间无相对变形，从而呈现出刚性颗粒运动的簇，又称为刚性簇。

6. DFN 和 fractures

DFN (Discrete Fracture Network)，称为离散裂隙网络，fracture (裂隙) 是指单一裂隙，一个 DFN 是一系列 fractures 的集合。

7. damping

阻尼 (damping) 是用来耗散系统内部的能量。可以通过三种方式来消耗系统内部能量：①摩擦；②接触中的黏壶 (dashpot) 部分；③在运动方程中设置局部阻尼 (local

damping), 静态求解时, 设置较大局部阻尼, 加快计算平衡, 在动力求解时, 需要设置合理的局部阻尼。

在 PFC4.0 以前版本, 局部阻尼被默认设置为 0.7, 在 PFC5.0 中, 其被默认设置为 0, 可以通过 ball attribute 和 clump attribute 加关键字 damp 来设置局部阻尼大小。

1.3 PFC5.0 软件的新特点

PFC5.0 是基于颗粒流原理进行的代码重新设计, 增加了代码库内容, 并对计算带来巨大优势:

1) 自动多线程设计有效提高了采用多核处理器时的性能。在不改变数据文件的前提下, 模型运行的更快。

2) 杠杆算法设计提供了更精确、快速和可靠的结果, 其主要优势如下:

(1) 多线程空间搜索和接触判断提高了复杂粒径分布和快速流动问题的执行速度。

(2) 改进了墙构成逻辑, 支持几何图形表面数据的导入 (3D 的三角形面, 文件格式包括 stl 和 dxf 等)。与 PFC4.0 版本相比, 墙构成逻辑支持快速运行, 精确地解决了凸面和凹面边缘之间的接触问题, 计算效率更高。

(3) 加强的簇处理能力容易并有效地生成各种球和簇, 因此可以减少创建规模较大模型的时间。

(4) 改进的周期性空间逻辑 (periodic 边界) 支持球, 簇和所有的接触模型。

(5) 改进的簇逻辑使复杂形状简单化。簇是一个刚性球组合体, 用户可以指定内部特性。通过簇模板可以自动从表面描述生成, 而其内部特性可由计算指定, 借助簇模板可以大量随机生成并可可视化。

(6) 扩展的球/簇生成程序, 可以快速生成考虑级配等球和簇复杂装配的模型。

3) 支持远程交流。使用者能指定接触的相互作用距离以便于力和力矩在颗粒间以一定距离发展 (例如地磁力、毛细血管作用等)。

4) 扩展了 FISH 语言和函数库, 包括函数自变量、局部变量、内联的 FISH、矩阵、张量、编译等, 可以快速提供各种综合性的接触模型变量, 减轻了编写数据文件的繁重工作。

5) 使用 OpenGL 编制了新的用户界面, 提高了图形可视化的速度, 更新了大量绘图条目和范围过滤器; 内嵌编辑器, 可以高亮显示文本; 增加了文件搜索和 FISH 变量探索, 处理数据和保存文件的项目管理等功能。

6) 将软件说明综合到一个文件 (PFChelp.chm) 中, 可以快速浏览与查询相关说明。

7) 引入了接触模型分配表, 使接触设置具有很大的灵活性; 使用 range 逻辑选择, 不需要复杂的 FISH 函数即可分配接触模型, 当接触创建的时候, CMAT 即提供接触模型和它的属性 (来源于两个接触面的特性), 解决非均质材料特性的复杂模型能就可以快速合成。

8) 引入了离散裂隙网络功能, 可以实现裂隙网络生成、导入、导出、过滤, 可视化等功能。如果与 PFC5.0 嵌入的平行黏结模型相结合, 很容易模拟工程中的节理裂隙岩体。

1.3.1 PFC5.0 新增选项

以下的特性和附件是 PFC5.0 里新提供的：

(1) 热选项。热选项模拟热在材料中的瞬态流动、诱发位移，以及力的后期发展。热模型可以独立运行或者与力学模型耦合计算。产生热应变用来解释颗粒与黏结材料的热量。另外，墙可以设置温度来施加热边界条件。

(2) C++ 插件选项。C++ 插件选项主要用于：①C++ 用户自定义接触模型；②C++ 用户自定义 FISH。

C++ 用户自定义接触模型组件可以将新的接触模型添加到 PFC 程序中。一个接触模型必须能描述接触中力一位移间的响应，在每一个循环中，PFC 程序将调用接触模型，在两个接触实体大小相等，方向相反的方向更新力和力矩。这个用户自定义接触模型需要 Visual Studio 2010 C++ 来编写，同时编译成 dll（动态链接库）文件，然后在一个 PFC 模拟中加载。

C++ 用户自定义 FISH 可以令使用者在模拟期间执行 C++ 代码。这些 FISH 也通过 C++ 来编写，同时被编译成 dll（动态链接库）文件供 PFC 数值模拟随时加载。这个组件可以代替 FISH 函数，当一个循环中存在大量的模型实体时，可以大大加快执行速度。

(3) 流体力学耦合计算控件 (PFC3D)。PFC3D5.0 中 CFD (CCFD) 控件将 PFC3D 的离散元计算与 CCFD 的计算流体力学代码耦合起来。CCFD 提供一个粗糙的网格流体框架，用来模拟颗粒与流体之间相互作用的问题。粗糙的网格意味着流体网格的每个单元需要包含较大数量的 PFC3D 球，相关问题可以应用到大量的工程问题，如沙沉降、泥石流、流化床以及气体输送中。

1.3.2 停止使用的选项

(1) 基本流体分析选项。4.0 及以前版本中固定粗糙的网格流体流动方案太过于局限，在 PFC5.0 中基本流体分析选项已经停用，通过 CCFD 附件代之以一个更灵活的粗糙网格方案。同时，C++ 粗糙网格流体界面覆盖了 PFC5.0 的计算，这个界面可以耦合 PFC5.0 和任何流体动力学代码使用。

(2) 并行处理选项。PFC4.0 并行处理选项所提供的分布式并行不方便使用，并行处理选项在 PFC5.0 中已经停止使用。因此 PFC5.0 采用多线程自动并行处理，自动根据计算机的能力进行配置，大大提高了计算效率。

(3) 用户编写 C++ 代码选项是 C++/UDM 选项中之一，在 PFC5.0 中停止使用。这个功能在 PFC5.0 被 C++ 插件选项与 C++ 用户自定义 FISH 组件所取代。

(4) Itasca 查看器选项。在 PFC5.0 里 Itasca 查看器选项停止使用。这个功能被 PFC5.0 用户界面所取代。

1.3.3 PFC4.0 与 5.0 对比

注意：PFC5.0 的代码与 4.0 的代码互不兼容。

1) PFC5.0 命令显著不同于 PFC4.0。虽然有些基本概念与命令仍然保持完整和一致性（例如 ball generate 命令创建不重叠球），但语法结构已经进行了大量改进。引入了许多新的概念，如 ball distribute 命令创建重叠的球来匹配目标孔隙率。

2) 在 PFC5.0 里，在所有的 FISH 变量声明中采用了点号 (.)，从而可以更好地识

别变量的逻辑类型, 如 `math` 变量类型可以很容易区分 (比如 `math.pi`, `math.sin`, `math.abs` 等)。另外, FISH 声明可以采用更加冗长的方式进行命名。例如在 PFC4.0 里一个球的 x 方向位置可以通过 `b_x` 来声明, 在 PFC5.0 里则是通过 `ball.pos.x` 来声明, 虽然名称更长, 但使得数据文件修改后可读性更好。这个变化对新使用者来说, 将会减少大量的时间来熟悉 FISH 规则, 有利于更有效地使用 FISH。

3) 在 PFC5.0 里, FISH 设计功能显著扩展。链表概念不再存在, 而是引入了带着 `list` 后缀的对象容器 (例如 `ball.list`)。一个列表通过 `loop foreach` 就可以实现一个循环。另一个需要强调的 FISH 功能是 `map` 数据结构的添加。由 (key, value) 集合组成的关联数组。可以通过特殊键来查阅值。键可以是一个整型数、浮点数或者字符串。这个数据结构比起数组数据结构更加有效。

4) 加强文档和帮助工具。整个 PFC 文档都在帮助文件 (`PFChelp.chm`) 里, 文档可以按照索引或搜索获得相关内容的帮助。这个改变允许创建链接, 以便于导航到相关的目录。用户在编辑区或者命令行可以通过按 `F1` 键快速地跳到指定命令或 FISH 函数的文档。Help 将会寻找当下光标位置对应的整行, 也可以为一个指定命令或 FISH 声明高亮文本来查阅文档。

5) 大、小写敏感的去掉。

在 PFC5.0 中去除了大、小写敏感检查, `fred` 和 `FRED` 两个 FISH 变量是完全等同的。因此命令或 FISH 声明可以随意地采用大写、小写或混写模式。

6) 安全转换没有被废除。

PFC5.0 中, FISH 函数、变量在命令行中的调用, 为了减少混淆和歧义, 必须加 `@` 符号, 这一点与 4.0 及以前版本不同。

7) 宏定义 (Macros) 的移除。

在 PFC5.0 里 `Macros` 命令被弃用了。

8) 二维和三维代码。

当安装 PFC 的时候, 2D 和 3D 版本的代码同时安装, 并被放到一个文件夹下。这是因为 PFC2D 和 PFC3D 的代码库几乎完全相同, 命令和 FISH 函数几乎也是完全相同的。但必须执行 PFC2D 代码来生成一个 2D 模型, PFC3D 代码来生成一个 3D 模型。

9) 多线程和确定性分析。

PFC 通过多核架构上循环中的计算加载分开形成多线程计算。默认情况下, PFC 在主机系统上使用可提供的最佳线程, 也可以通过 `set processors` 命令调整线程数量。

在多线程过程中, 特殊计算发生的顺序将会改变。这将导致舍入误差不同程度地增加。例如如果要以特定顺序处理一长列的浮点数 (从前到后, 从后向前, 或者其他方式) 多次累加起来, 得到的总和不完全一致。

如果应用到 PFC 模型, 在不同的 PFC 模型副本中, 相同的时间模拟接触的顺序是不同的。那么接触力将会以不同的顺序累加到球 (balls) 上, 每个 ball 上的力都会有轻微不同, 这会导致完全相同的模型在连续计算过程中结果缺少重复性。为了解决这个问题, PFC 在牺牲效率前提下, 强行将计算顺序约定以确定性的方式操作, 以确保结果的重复性。如果重复性不重要, 可以通过 `set deterministic` 命令关闭该模式, 来充分利用多线程性能。