

基于双尺度分析的脆性断裂应变梯度理论

饶一鹏^{†1,2} 向美珍¹ 崔俊芝²

¹ 北京应用物理与计算数学研究所 (IAPCM)

² 中国科学院计算数学与科学工程计算研究所 (ICMSEC)

2022 年 5 月 13 日

- 1 研究背景
- 2 双尺度渐进展开方法简介
- 3 模型推导
- 4 数值结果
- 5 总结与展望

1 研究背景

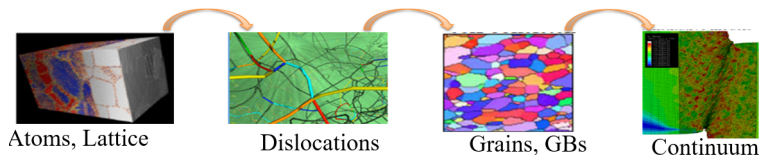
2 双尺度渐进展开方法简介

3 模型推导

4 数值结果

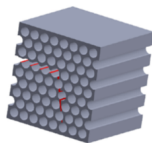
5 总结与展望

- 材料的断裂行为取决于材料的微结构。微结构对宏观断裂的影响是重要的、具有挑战性的基础科学问题。
- 微裂纹是脆性材料中最典型的微结构。

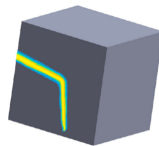


本工作就是针对包含大量微裂纹的脆性材料的宏观断裂行为开展多尺度建模研究。

如何在损伤断裂模拟中充分考虑细观尺度微结构分布形态？



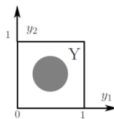
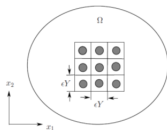
(a)



(b)

- 直接数值模拟：分析每一个微结构受力断裂情况。网格剖分复杂，计算量大。
- 均匀化宏观损伤力学方法模拟：等效为均匀材料，用内部损伤变量 d 来描述材料局部状态。
 - ①: 如何得到依赖于内部损伤变量 d 的本构参数 $\mathbf{C}(d)$?
 - ②: 建立包含微结构形态的断裂准则或损伤演化方程。

- 1 研究背景
- 2 双尺度渐进展开方法简介
- 3 模型推导
- 4 数值结果
- 5 总结与展望



- 含微结构分布形态的连续介质力学方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_j} \left[C_{ijhk}^\epsilon(\mathbf{x}) \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_h^\epsilon(\mathbf{x})}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k^\epsilon(\mathbf{x})}{\partial x_h} \right) \right] = f_i(\mathbf{x}) & (i = 1, \dots, n) \\ \mathbf{u}^\epsilon(\mathbf{x}) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \end{cases}$$

- 双尺度渐进展开解(Lions et al., 1960s):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^\epsilon(\mathbf{x}) &= \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) + \sum_{l=1}^{\infty} \epsilon^l \sum_{\langle \alpha \rangle = l} \mathbf{N}_\alpha(\mathbf{y}) D_\alpha^l \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) + \epsilon \sum_{\alpha_1=1}^n \mathbf{N}_{\alpha_1}(\mathbf{y}) \frac{\partial \mathbf{u}^0(\mathbf{x})}{\partial x_{\alpha_1}} + \epsilon^2 \sum_{\alpha_1, \alpha_2=1}^n \mathbf{N}_{\alpha_1 \alpha_2}(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}^0(\mathbf{x})}{\partial x_{\alpha_1} \partial x_{\alpha_2}} + \dots \end{aligned}$$

$\mathbf{y} = \mathbf{x}/\epsilon$ 表示细观坐标 (物质点在参考周期单胞中的位置) ;

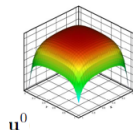
$\mathbf{N}_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n}$ 为定义在周期单胞 Y 上 PDE 的解 (又称为单胞函数) ;

\mathbf{u}^0 是宏观均匀化问题的解。

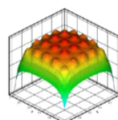
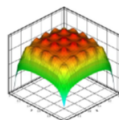
- 基于双尺度渐进展开理论的双尺度有限元方法（崔俊芝等）

宏观上求解均匀化方程得到 \mathbf{u}^0 ，细观上求解单胞方程并进行一阶或二阶修正。计算精度接近细尺度直接有限元计算，计算量与均匀材料的宏观有限元计算相当。¹

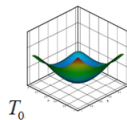
位移场：



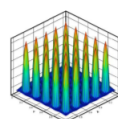
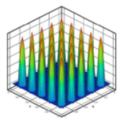
\mathbf{u}^0



温度场：



T_0



均匀化解

Two-scale FE（崔等）

Single-scale FE

¹杨自豪，崔俊芝，西北工业大学博士论文,2014.

- 1 研究背景
- 2 双尺度渐进展开方法简介
- 3 模型推导**
- 4 数值结果
- 5 总结与展望

脆性材料建模框架

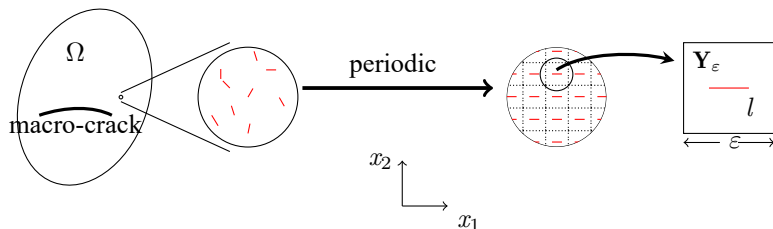


图 1: locally periodic microstructure.

简化：周期分布的长度为 l 的微裂纹。

思想：宏观物质点用微观无穷大周期性代表体积单元表征。

两个参数表征微结构分布形态：单胞的边长 ϵ 、相对裂纹长度 $d = l/\epsilon$ 。

周期性代表体积单元上的弹性力学方程

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{ij}^\epsilon}{\partial x_j} = 0 & \text{in } \mathbb{R}^2 \\ \sigma_{ij}^\epsilon = a_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}^\epsilon) \\ e_{ij}(\mathbf{u}^\epsilon) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i^\epsilon}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^\epsilon}{\partial x_i} \right). \end{cases}$$

- 单胞函数 PDE

$$\begin{cases} \frac{d}{dx_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial y_i} \\ \mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon \mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 \mathbf{u}^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \cdots \end{cases}$$

$$(1) \begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_j} (a_{ijkl} e_{ykl}(\mathbf{u}^{(0)})) = 0, & \text{in } Y_s, \\ a_{ijkl} e_{ykl}(\mathbf{u}^{(0)}) n_j = 0, & \text{on } C_Y^\pm; \end{cases}$$

$$(2) \begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_j} (a_{ijkl} (e_{xkl}(\mathbf{u}^{(0)}) + e_{ykl}(\mathbf{u}^{(1)}))) = 0, & \text{in } Y_s, \\ a_{ijkl} (e_{ykl}(\mathbf{u}^{(1)}) + e_{xkl}(\mathbf{u}^{(0)})) n_j = 0, & \text{on } C_Y^\pm; \end{cases}$$

$$(3) \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_j} a_{ijkl} (e_{xkl}(\mathbf{u}^{(0)}) + e_{ykl}(\mathbf{u}^{(1)})) + \frac{\partial}{\partial y_j} a_{ijkl} (e_{xkl}(\mathbf{u}^{(1)}) + e_{ykl}(\mathbf{u}^{(2)})) = 0, \\ a_{ijkl} (e_{xkl}(\mathbf{u}^{(1)}) + e_{ykl}(\mathbf{u}^{(2)})) n_j = 0, \end{cases}$$

● 均匀化解与等效弹性模量

$$\xRightarrow{(1)} \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x})$$

$\mathbf{u}^{(1)}$ 形式解(Lions):

$$\mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{N}^{pq}(\mathbf{y}) e_{xpq}(\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}))$$

$$\xRightarrow{(2)} \begin{cases} \frac{\partial}{\partial y_j} (a_{ijkl} e_{ykl}(\mathbf{N}^{pq}) + a_{ijpq}) = 0, & \text{in } Y_s, \\ (a_{ijkl} e_{ykl}(\mathbf{N}^{pq}) + a_{ijpq}) n_j = 0, & \text{on } C_Y^\pm. \end{cases}$$

$$\xRightarrow{(3)} \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x_j} (C_{ijkl} e_{xkl}(\mathbf{u}^{(0)})) = 0, \\ C_{ijkl} = \int_{Y_s} a_{ijkl} + a_{ijmn} e_{ymn}(\mathbf{N}^{kl}) \, dy. \end{cases}$$

C_{ijkl} 的方程定义了微结构对均匀化本构参数的影响。

● RVE 单胞上的应变能

代表体积单元的应变能密度:

$$E = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{e} = \frac{1}{2} a_{ijkl} e_{ij}(\mathbf{u}^\varepsilon) e_{kl}(\mathbf{u}^\varepsilon).$$

根据双尺度展开, 代入得到:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} a_{ijkl} e_{ij}(\mathbf{u}^0) e_{kl}(\mathbf{u}^0) + \frac{1}{2} a_{ijkl} \mathbf{N}_{i,j}^{pq} \mathbf{N}_{k,l}^{mn} e_{xpq}(\mathbf{u}^0) e_{xmn}(\mathbf{u}^0) \\ &\quad + \frac{\varepsilon^2}{2} a_{ijkl} \mathbf{N}_i^{pq} \mathbf{N}_k^{mn} \frac{\partial e_{xpq}(\mathbf{u}^0)}{\partial x_j} \frac{\partial e_{xmn}(\mathbf{u}^0)}{\partial x_l} + a_{ijkl} \mathbf{N}_{i,j}^{pq} e_{xpq}(\mathbf{u}^0) e_{xkl}(\mathbf{u}^0) \\ &\quad + \varepsilon a_{ijkl} \left(e_{xij}(\mathbf{u}^0) + \mathbf{N}_{i,j}^{pq} e_{xpq}(\mathbf{u}^0) \right) \mathbf{N}_k^{mn} \frac{\partial e_{xmn}(\mathbf{u}^0)}{\partial x_l} \end{aligned}$$

引入 $D_{pqjmn} = \int_{Y_s} a_{ijkl} \mathbf{N}_i^{pq}(\mathbf{y}) \mathbf{N}_k^{mn}(\mathbf{y}) d\mathbf{y}$, 得到单胞应变能:

$$\begin{aligned} W &= \int_{Y_\varepsilon} E d\mathbf{x} \\ &= \frac{\varepsilon^2}{2} C_{pqkl} \langle e_{xpq}(\mathbf{u}^0) \rangle \langle e_{xkl}(\mathbf{u}^0) \rangle + \frac{\varepsilon^4}{2} D_{pqjmn} \left\langle \frac{\partial e_{xpq}(\mathbf{u}^0)}{\partial x_j} \right\rangle \left\langle \frac{\partial e_{xmn}(\mathbf{u}^0)}{\partial x_l} \right\rangle \end{aligned}$$

- 准静态能量释放率与宏观瞬态断裂准则

Griffith 瞬态断裂准则:

$$G = G_c$$

准静态能量释放率:

$$G = -\frac{dW}{dl}.$$

引入记号:

$$\mathcal{E}_{ij} = \langle e_{xij}(\mathbf{u}^0) \rangle, \quad \mathcal{E}_{ij,k} = \left\langle \frac{\partial e_{xij}(\mathbf{u}^0)}{\partial x_k} \right\rangle.$$

得到包含微结构效应的断裂准则:

$$G = -\frac{\varepsilon}{2} \frac{dC_{ijkl}(d)}{dd} \mathcal{E}_{ij} \mathcal{E}_{kl} - \frac{\varepsilon^3}{2} \frac{dD_{pqjmntl}(d)}{dd} \mathcal{E}_{pq,j} \mathcal{E}_{mn,l} = G_c.$$

可以看到应变梯度被自然地引入。

1 研究背景

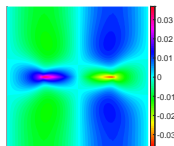
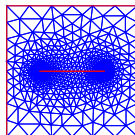
2 双尺度渐进展开方法简介

3 模型推导

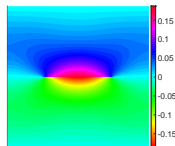
4 数值结果

5 总结与展望

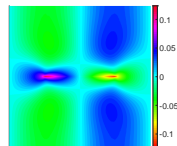
- 单胞函数



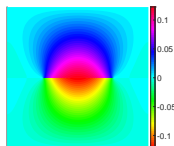
(a) N_1^{11}



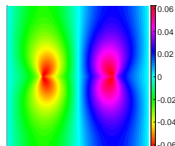
(b) N_1^{12}



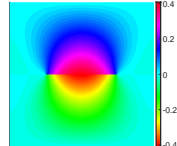
(c) N_1^{22}



(d) N_2^{11}

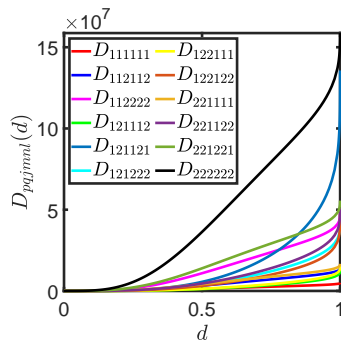
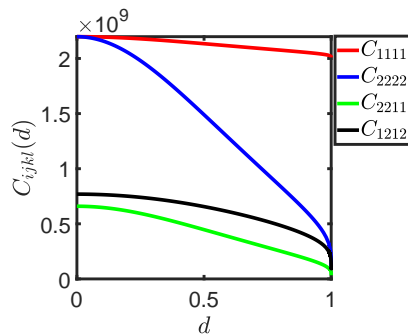


(e) N_2^{12}



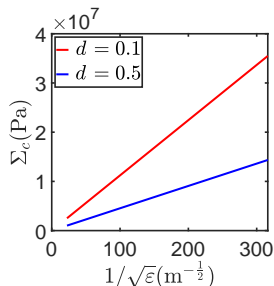
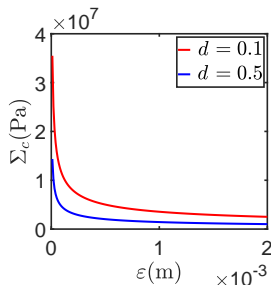
(f) N_2^{22}

• 等效模量



- 断裂强度的尺度依赖特性

取材料参数 $E = 2\text{GPa}$, $\nu = 0.3$, $G_c = 1\text{J/m}^2$



图像符合已知的 Hall-Petch 关系

- 断裂强度的应变梯度效应

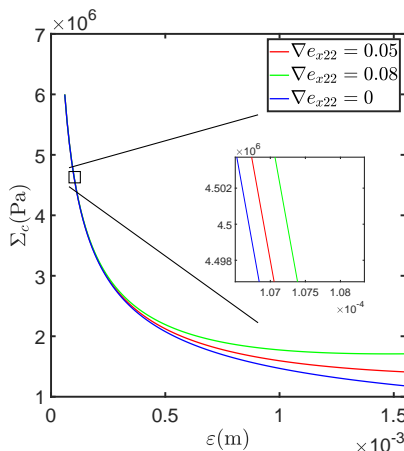
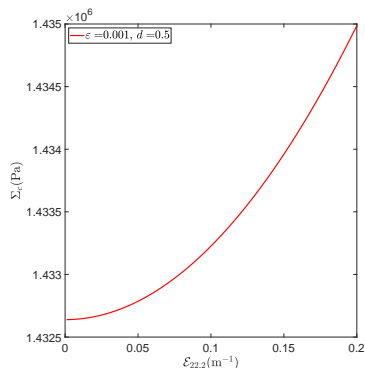
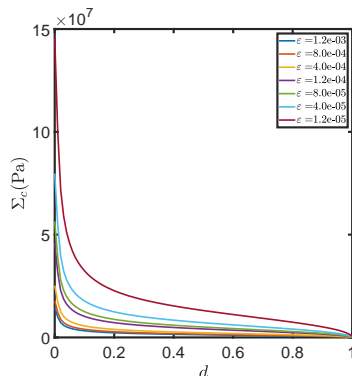


图 2: Critical stress as a function of ε , for different strain gradient with damage $d = 0.5$.

随着微结构特征尺度增加，应变梯度影响越明显，与已知物理规律相符合。

● 裂纹长度、应变梯度对断裂强度的影响



微裂纹长度越小，断裂强度对微裂纹长度的敏感性越强；
应变梯度越大，断裂强度对应变梯度的敏感性越强。

- 宏观断裂破坏行为模拟-V 缺口平板准静态拉伸

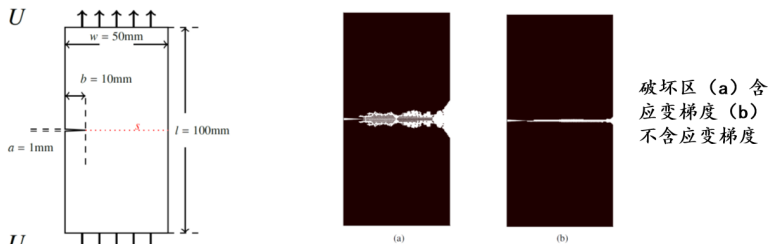
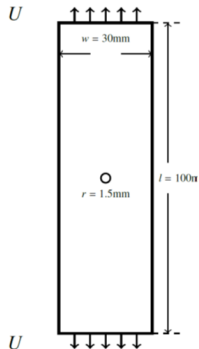


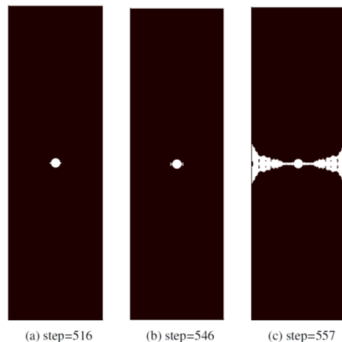
表 1: Critical loading stress(MPa) for different microstructure size (ε).

	$\varepsilon = 5 \times 10^{-4}\text{m}$	$\varepsilon = 1 \times 10^{-3}\text{m}$	$\varepsilon = 1.2 \times 10^{-3}\text{m}$
Σ_c^*	0.97	0.69	0.63
Σ_c	0.99	0.74	0.82
Σ_c/Σ_c^*	1.02	1.07	1.30

- 宏观断裂破坏行为模拟-中心孔洞平板准静态拉伸

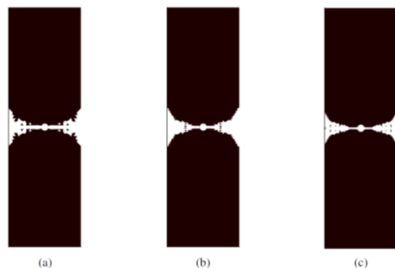


含孔有机玻璃 (PMMA) 板拉伸



逐步破坏过程

- 宏观断裂破坏行为模拟-中心孔洞平板准静态拉伸



不同网格下计算的破碎区

表 2: Critical loading stress (GPa), with $\varepsilon = 4 \times 10^{-3}$ m ($r = 1.5 \times 10^{-3}$ m).

	4976 elements	9336 elements	21248 elements
Σ_c^*	18.7	17.0	14.7
Σ_c	27.1	26.0	25.9

引入应变梯度削弱了网格依赖性。

- 定量重现系列实验结果

最后给出了本模型的计算结果与实验结果²的对比，该结果进一步显示出了模型的有效性。

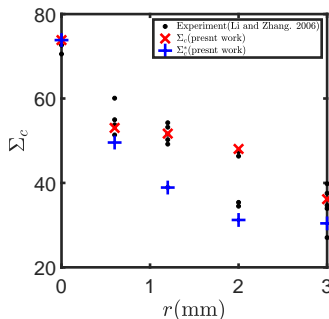


图 3: Comparison between predicted strength and experimental data when $\varepsilon = 1 \times 10^{-3}$ m.

²Li J, Zhang X B . A criterion study for non-singular stress concentrations in brittle or quasi-brittle materials[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2006, 73(4):505-523.

1 研究背景

2 双尺度渐进展开方法简介

3 模型推导

4 数值结果







5 总结与展望

总结

我们针对含有大量微裂纹材料的宏观断裂行为开展了双尺度建模，建立了包含材料微结构参数及应变梯度效应影响的裂纹失稳准则。

- 基于严格双尺度数学分析没有引入任何的唯象参数；
- 自然地将材料的微结构参数 (ε) 和应变梯度效应引入到失稳准则中，从而可直接分析微结构对宏观断裂行为的影响；
- 数值实验结果与现有实验结果可以较好的相符。

此工作已发表于固体力学的旗舰期刊 **JMPS**³。

³Rao, Y., Xiang, M., Cui, J., 2022. A strain gradient brittle fracture model based on two-scale asymptotic analysis. Journal of the Mechanics and Physics of Solids , 104752.      

展望

- 在模型里面引入应变率效应以适应高应变率下层断裂模拟，该工作正在开展；
- 二维模型扩展到三维模型，该工作正在开展；
- 脆性材料扩展到粘性材料。

谢谢各位老师和同学！
请提出宝贵建议。