基于双尺度分析的脆性断裂应变梯度模型

饶一鹏[1,2]　向美珍[2]　崔俊芝[1]

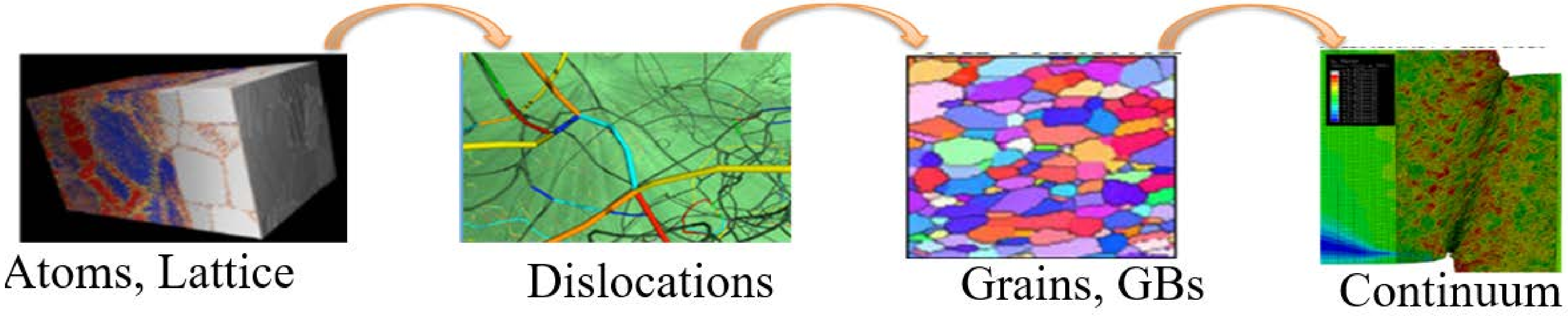
[1]中国科学院计算数学与科学工程计算研究所

[2]北京应用物理与计算数学研究所

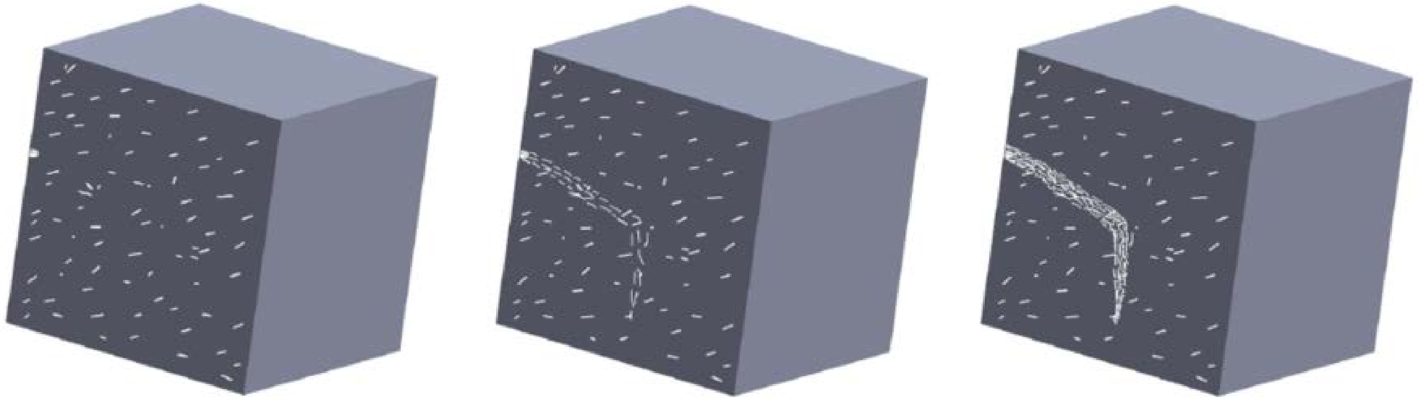
2023 年 1 月 7 日　线上报告

目录

研究背景与意义



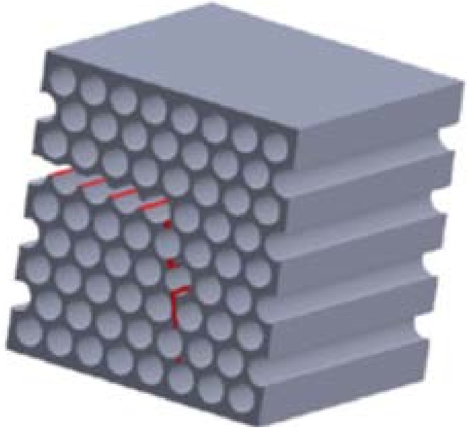
- 材料的断裂行为取决于材料的微结构。**微结构**对宏观断裂的影响是重要的、具有挑战性的基础科学问题，这类问题也往往伴随**应变梯度**与**应变率**效应 。

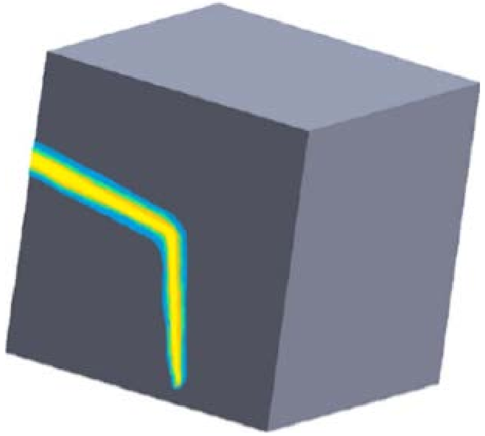


- **微裂纹**是脆性材料中最典型的微结构。

研究背景与意义

问题：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？

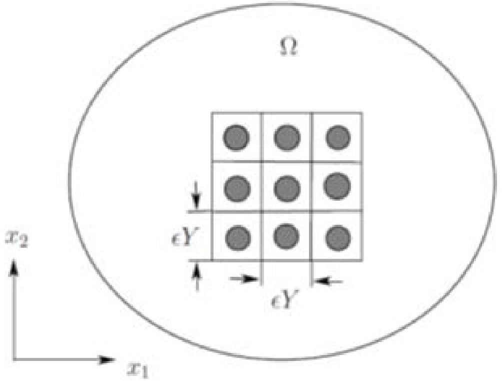


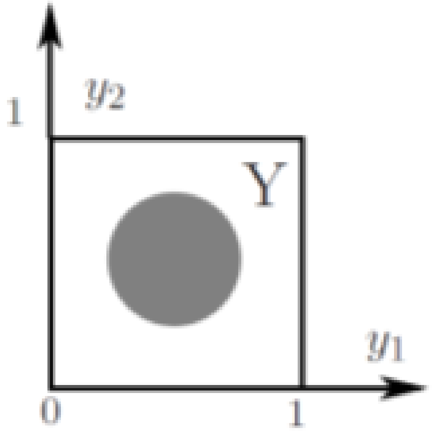


- 直接数值模拟：分析每一个微结构受力断裂情况。网格剖分复杂，计算量大。
- 均匀化宏观损伤力学方法模拟：等效为均匀材料，用内部损伤变量d来描述材料局部状态。

1. 如何得到依赖于内部微结构变量 d 的本构参数 $C(d)$?
2. 建立包含微结构形态的断裂准则或损伤演化方程。

双尺度渐进展开方法简介





- 含微结构分布形态的连续介质力学方程：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial x_j}\left[C^{\varepsilon}_{ijhk}(\mathbf{x})\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u^{\varepsilon}_h(\mathbf{x})}{\partial x_k}+\dfrac{\partial u^{\varepsilon}_k(\mathbf{x})}{\partial x_h}\right)\right]=f_i(\mathbf{x}) \quad (i=1,\cdots,n) \\ \mathbf{u}^{\varepsilon}(\mathbf{x})=\overline{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) \end{cases}$$

- 双尺度渐近展开解(Lions et al., 1960s):

$$\mathbf{u}^{\varepsilon}(\mathbf{x})=\mathbf{u}^0(\mathbf{x})+\sum_{l=1}^{\infty}\varepsilon^l\sum_{<\alpha>=l}\mathbf{N}_{\alpha}(\mathbf{y})D^l_{\alpha}\mathbf{u}^0(\mathbf{x})$$

$$=\mathbf{u}^0(\mathbf{x})+\varepsilon\sum_{\alpha_1=1}^{n}\mathbf{N}_{\alpha_1}(\mathbf{y})\frac{\partial\mathbf{u}^0(\mathbf{x})}{\partial x_{\alpha_1}}+\varepsilon^2\sum_{\alpha_1,\alpha_2=1}^{n}\mathbf{N}_{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{y})\frac{\partial^2\mathbf{u}^0(\mathbf{x})}{\partial x_{\alpha_1}\partial x_{\alpha_2}}+\cdots$$

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

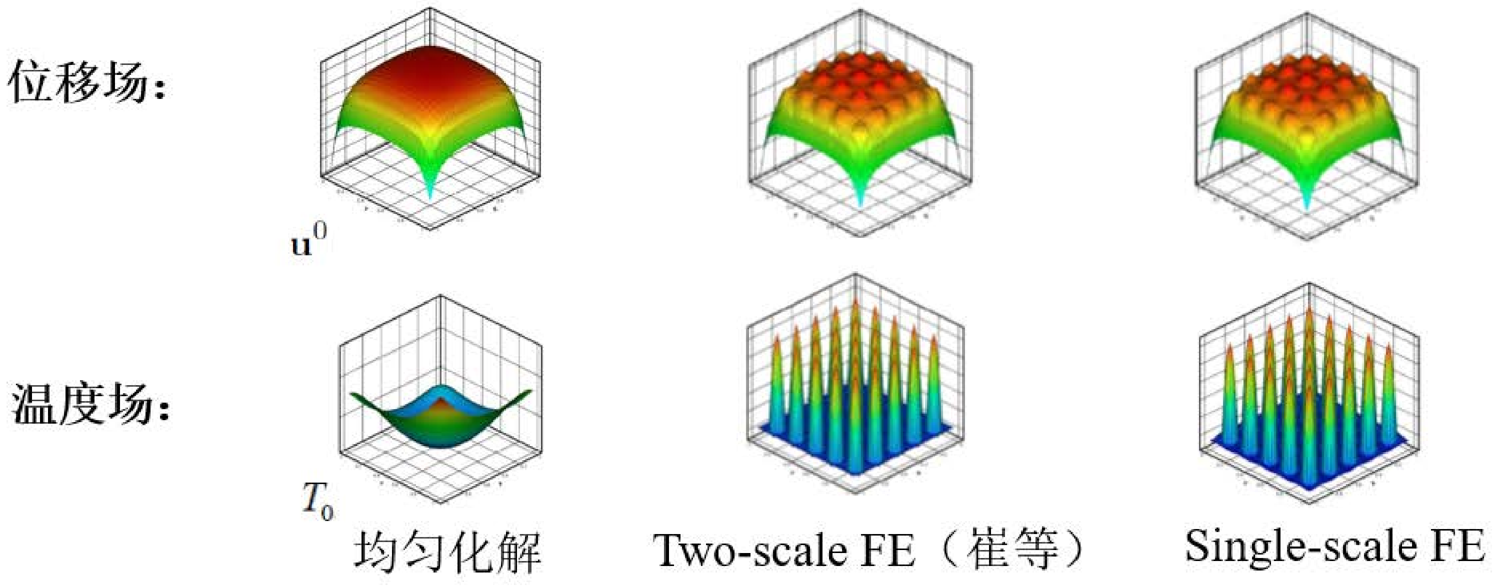
$\mathbf{N}_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n}$ 为定义在周期单胞 Y 上 PDE 的解（又称为单胞函数）

$\mathbf{u}^0$ 是宏观均匀化问题的解。

双尺度渐进展开方法简介

- 基于双尺度渐近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*。



二阶多尺度修正解的引入使得应力误差控制在 $O(\varepsilon)$ 量级，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。

*杨自豪，西北工业大学博士论文，2014.

模型推导

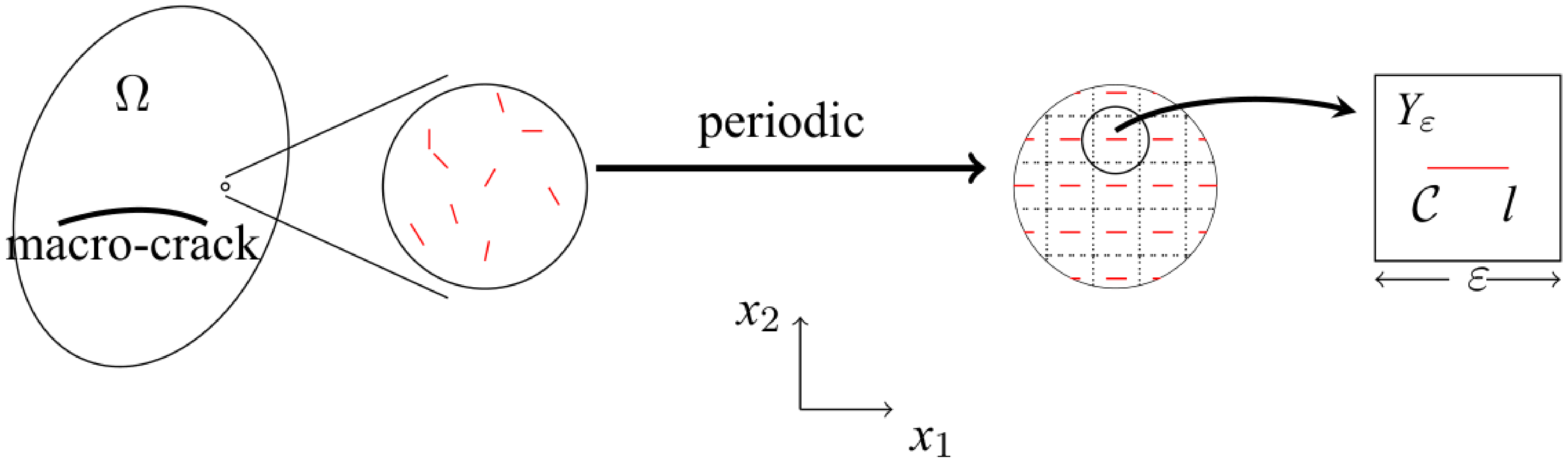


图 1: locally periodic microstructure.

- 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。
- 假设：裂纹均为双向等速率扩展，且扩展方向与裂纹原始方向保持一致。

微裂纹的失稳满足Griffith准则：$G = G_c(v)$，用 $d = l/\varepsilon \in [0,1]$来表示损伤变量。

模型推导

在$\mathbb{R}^2$上考虑周期性代表体积单元上的弹性力学方程：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \sigma_{ij}^{\varepsilon}}{\partial x_j} & = \rho \dfrac{\partial^2 u_i^{\varepsilon}}{\partial t^2} \qquad \text{in } \mathbb{R}^2 \\ \sigma_{ij}^{\varepsilon} & = a_{ijkl} e_{kl}(\mathbf{u}^{\varepsilon}) \\ e_{ij}(\mathbf{u}^{\varepsilon}) & = \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{\partial u_i^{\varepsilon}}{\partial x_j} + \dfrac{\partial u_j^{\varepsilon}}{\partial x_i}\right) \\ \boldsymbol{\sigma}^{\varepsilon} \cdot \vec{\mathbf{n}} & = 0 \qquad \text{on} \quad \mathcal{C}. \end{cases}$$

作尺度变换$\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$，考虑位移解$\mathbf{u}^{\varepsilon}$的双尺度渐近展开形式：

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

模型推导

将双尺度展开式代入方程，通过比较 ε 不同次幂便得到一系列方程：

$$(1)\ \varepsilon^{-2}\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial y_j}\left(a_{ijkl}e_{ykl}(\mathbf{u}^{(0)})\right) & = 0, \quad \text{in } Y_s,\\ a_{ijkl}e_{ykl}(\mathbf{u}^{(0)})n_j & = 0, \quad \text{on } C_Y^{\pm};\end{cases}$$

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

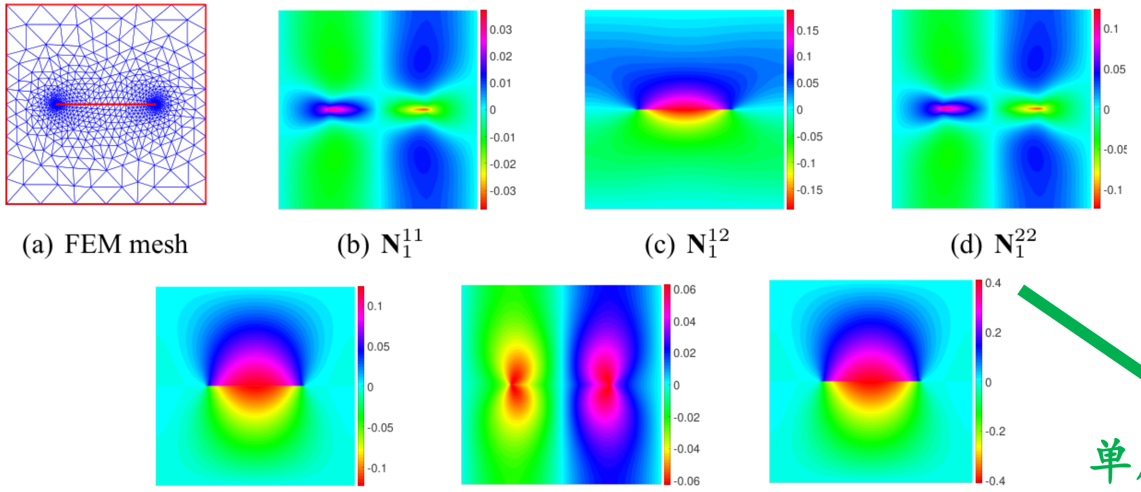
$$\mathbf{u}^{(1)}(\mathbf{x},\mathbf{y},t) = \mathbf{N}^{pq}(\mathbf{y})e_{xpq}(\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x},t))$$

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

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

$$(3)\ \varepsilon^{0}\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x_j}a_{ijkl}\left(e_{xkl}(\mathbf{u}^{(0)})+e_{ykl}(\mathbf{u}^{(1)})\right)+\dfrac{\partial}{\partial y_j}a_{ijkl}\left(e_{xkl}(\mathbf{u}^{(1)})+e_{ykl}(\mathbf{u}^{(2)})\right) & = \rho\dfrac{\partial^2 u_i^{(0)}}{\partial t^2}, \quad \text{in } Y_s,\\ a_{ijkl}\left(e_{xkl}(\mathbf{u}^{(1)})+e_{ykl}(\mathbf{u}^{(2)})\right)n_j & = 0, \quad \text{on } C_Y^{\pm}.\end{cases}$$

单胞函数满足的PDE



(a) FEM mesh (b) $\mathbf{N}_1^{11}$ (c) $\mathbf{N}_1^{12}$ (d) $\mathbf{N}_1^{22}$

(e) $\mathbf{N}_2^{11}$ (f) $\mathbf{N}_2^{12}$ (g) $\mathbf{N}_2^{22}$

单胞函数的数值解

$$\xrightarrow{(3)} \boxed{\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x_j}\left(C_{ijkl}e_{xkl}(\mathbf{u}^{(0)})\right) = \rho\dfrac{\partial^2 u_i^{(0)}}{\partial t^2},\\ C_{ijkl} = \displaystyle\int_{Y_s} a_{ijkl}+a_{ijmn}e_{ymn}(\mathbf{N}^{kl})\,\mathrm{d}y.\end{cases}}$$

均匀化方程

模型推导

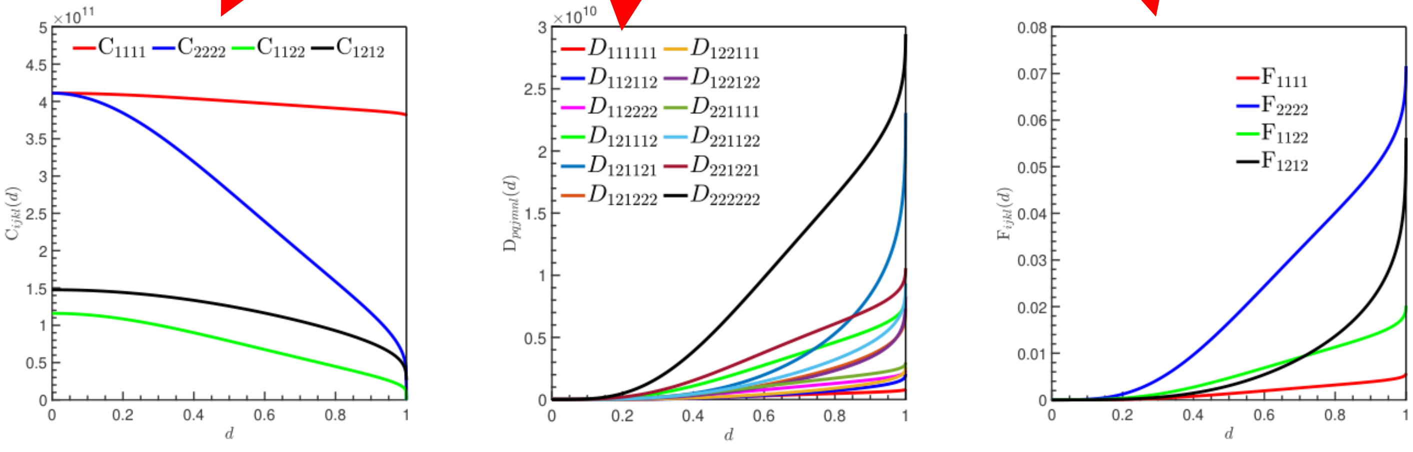
RVE位移场、速度场的双尺度一阶近似解 → RVE应变能密度、动能密度的双尺度近似 → RVE单胞上总应变能W、总动能K → 计算微裂纹扩展的动态能量释放率

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

$$K=\int_{Y_\varepsilon} T\,\mathrm{d}x=\frac{\varepsilon^2}{2}\rho\left\langle\frac{\partial u_i^0}{\partial t}\right\rangle\left\langle\frac{\partial u_i^0}{\partial t}\right\rangle+\frac{\varepsilon^4}{2}\rho F_{pqmn}\left\langle\frac{\partial e_{xpq}(\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x},t))}{\partial t}\right\rangle\left\langle\frac{\partial e_{xmn}(\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x},t))}{\partial t}\right\rangle$$

$$G=-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\mathrm{d}C_{ijkl}(d)}{\mathrm{d}d}\underbrace{\mathcal{E}_{ij}\mathcal{E}_{kl}}_{\text{应变}}-\frac{\varepsilon^3}{2}\frac{\mathrm{d}D_{pqjmnl}(d)}{\mathrm{d}d}\underbrace{\mathcal{E}_{pq,j}\mathcal{E}_{mn,l}}_{\text{应变梯度}}-\frac{\varepsilon^3}{2}\rho\frac{\mathrm{d}F_{pqmn}(d)}{\mathrm{d}d}\underbrace{\dot{\mathcal{E}}_{pq}\dot{\mathcal{E}}_{mn}}_{\text{应变率}}=G_c(v).$$

$$G=-\frac{\mathrm{d}(W+K)}{\mathrm{d}l}\overset{l=\varepsilon d}{=\!=\!=}-\frac{1}{\varepsilon}\frac{\mathrm{d}(W+K)}{\mathrm{d}d}$$



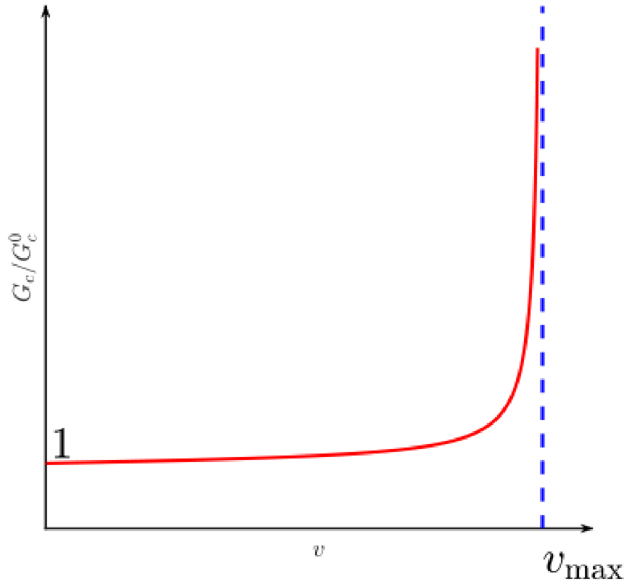
(a) (b) (c)

图 4: (a)$C_{ijkl}-d$ curve; (b)$D_{pqjmnl}-d$ curve; (c)$F_{ijkl}-d$ curve.

$$\begin{cases} C_{ijkl} = \int_{Y_s} a_{ijkl}+a_{ijmn}e_{ymn}(\mathbf{N}^{kl})\,\mathrm{d}\mathbf{y}\\ D_{pqjmnl} = \int_{Y_s} a_{ijkl}\mathbf{N}_i^{pq}(\mathbf{y})\mathbf{N}_k^{mn}(\mathbf{y})\mathrm{d}\mathbf{y}\\ F_{pqmn} = \int_{Y_s} \mathbf{N}_i^{pq}(\mathbf{y})\,\mathbf{N}_i^{mn}(\mathbf{y})\,\mathrm{d}\mathbf{y}\end{cases}$$

模型没有引入任何一个宏观唯象可调参数！

模型推导



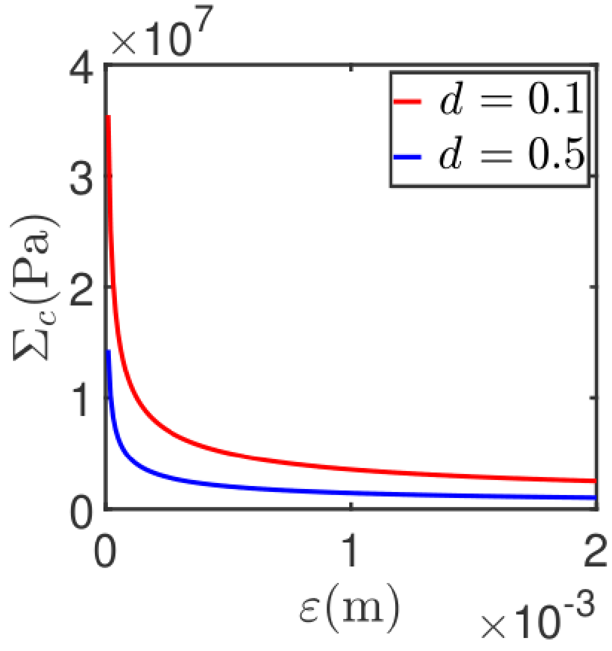
为了拟合Gross, D等人[1]给出的临界断裂能$G_c(v)$随裂纹扩展速度的变化曲线，用 $G_c(v)/G_c^0=1+\lambda\tan(\pi v/2C_R)$来描述临界能量释放率随裂纹速度的变化关系。其中，$\lambda$为人工参数，它反映了极限断裂能对裂纹扩展速度的敏感性;G_c^0为材料的静态临界断裂能；C_R为Rayleigh波速，它是I−型裂纹扩展的极限速度且有如下近似[2]：

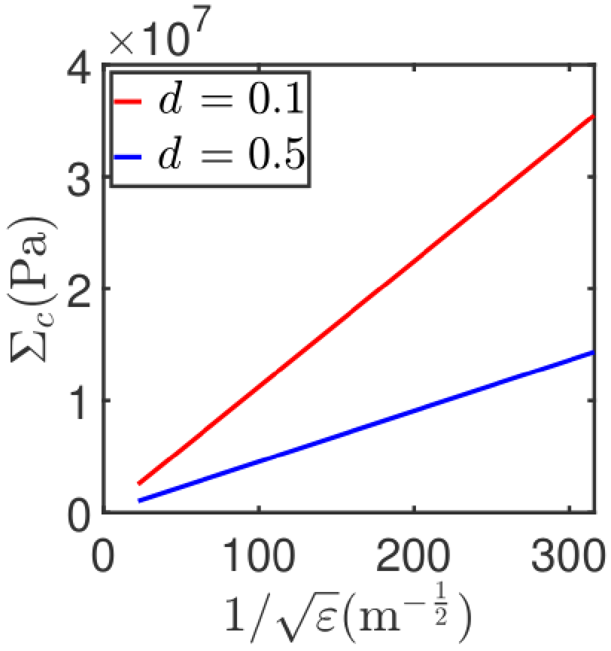
$$C_{\mathrm{R}}=\frac{0.862+1.14\nu}{1+\nu}\sqrt{\frac{E}{2\rho(1+\nu)}}$$

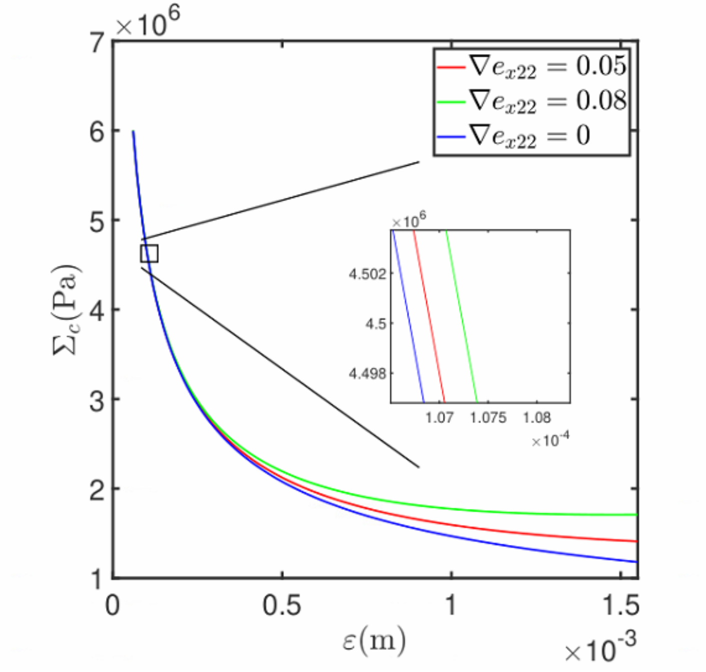
1. Gross, D., Seelig, T., 2017. Fracture mechanics: with an introduction to micromechanics. Springer.

2. Freund, L.B., 1998. Dynamic fracture mechanics. Cambridge university press..

数值结果（准静态）





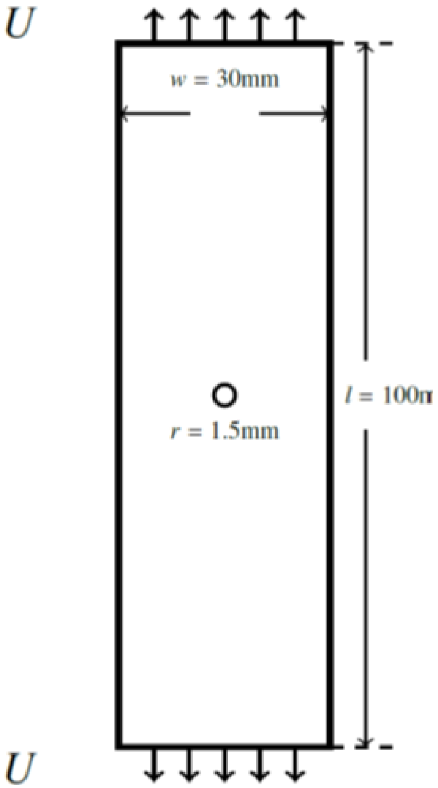


断裂强度尺度依赖：数值结果
与经典Hall-Patch关系[1]吻合。

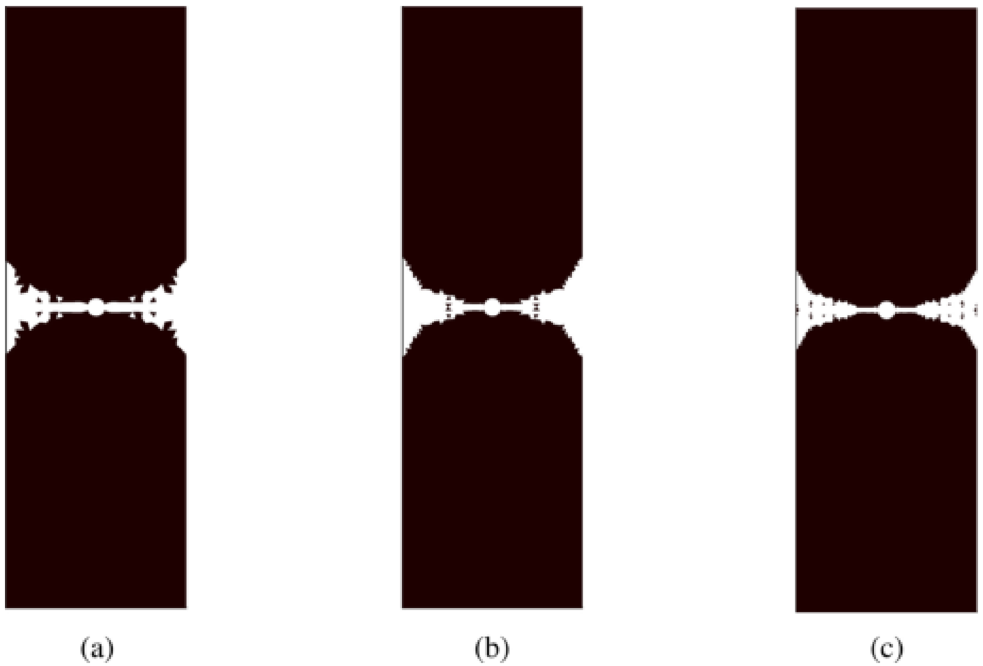
特征尺度增加，应变梯度影响
越来越明显

[1]大量实验证实：多晶体的屈服强度 σ^*与其晶粒大小d 满足关系：$\sigma^* = \sigma^0 + kd^{-\frac{1}{2}}$

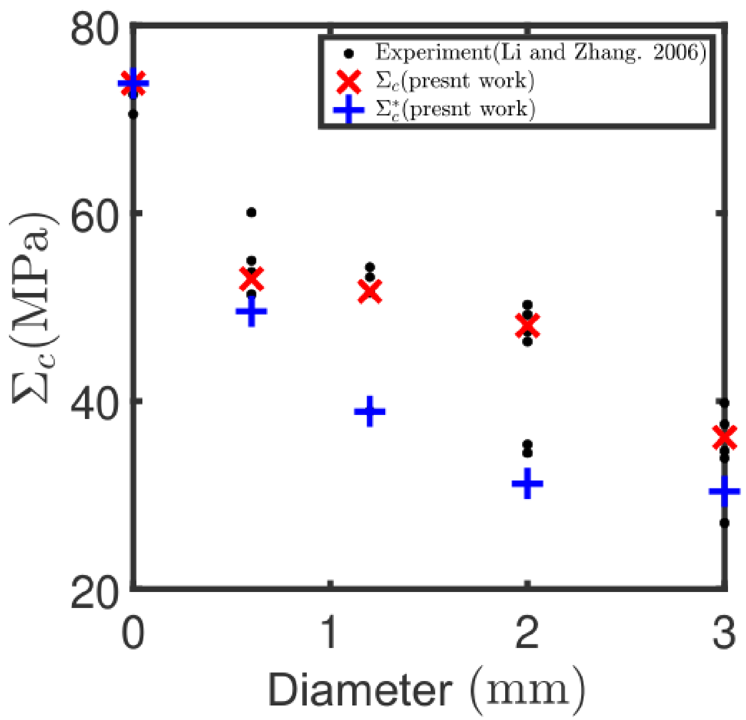
数值结果（准静态）



含孔有机玻璃（PMMA）板拉伸



不同网格下计算的损伤区



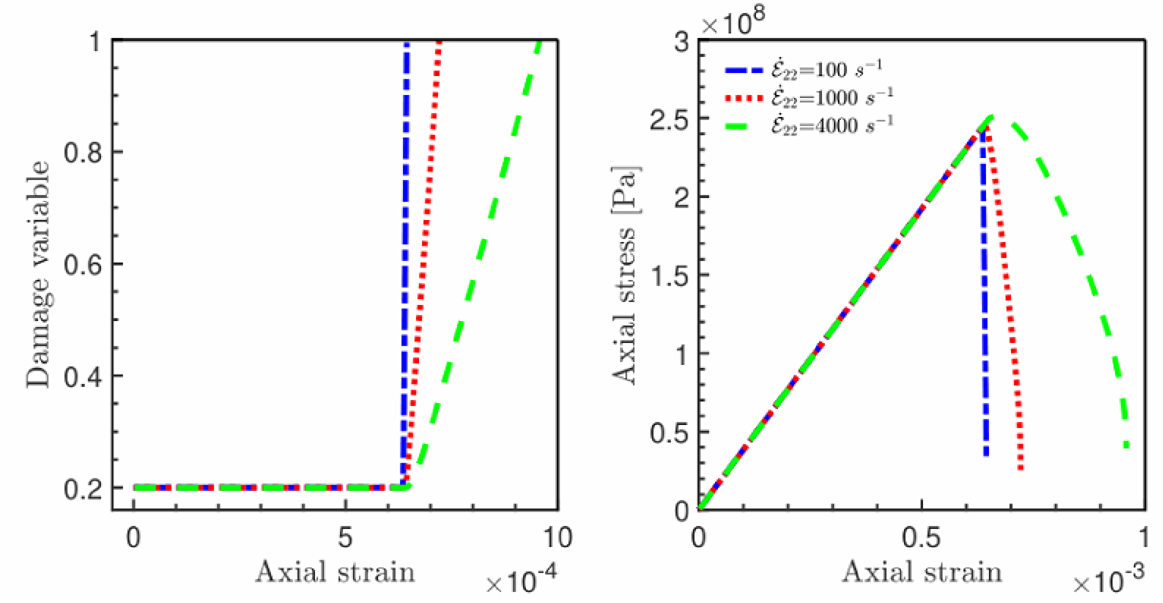
断裂强度：数值结果 VS. 实验结果

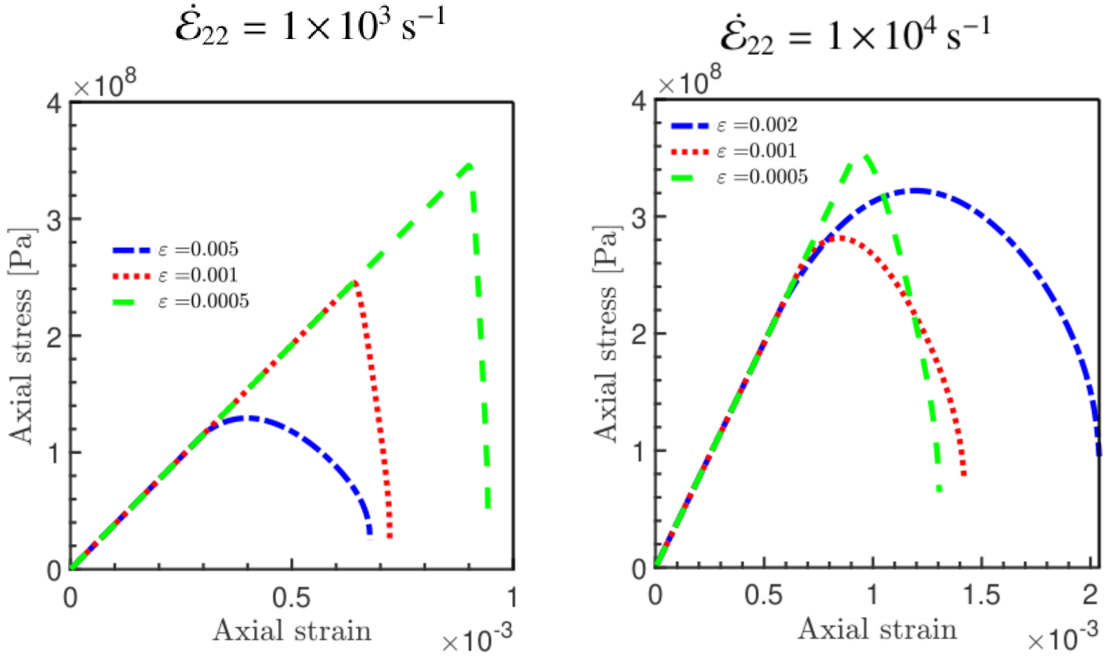
表 1: Critical loading stress (GPa), with $\varepsilon = 4 \times 10^{-3}$ m ($r = 1.5 \times 10^{-3}$ m).

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

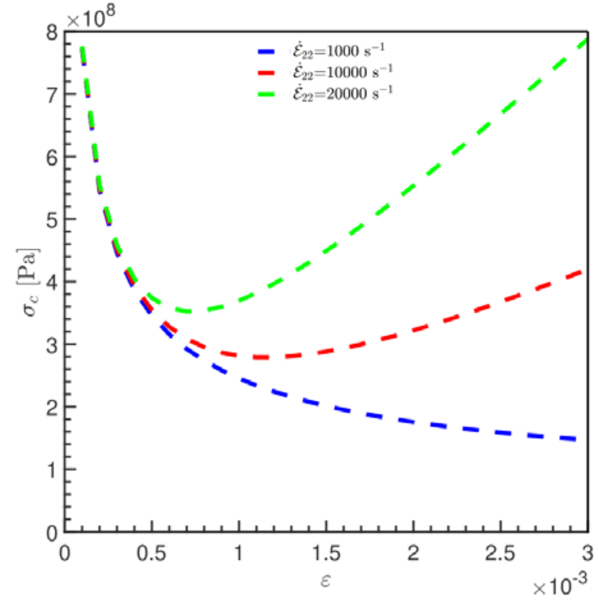
数值结果（动态）

损伤-应变、应力-应变关系的应变率影响曲线





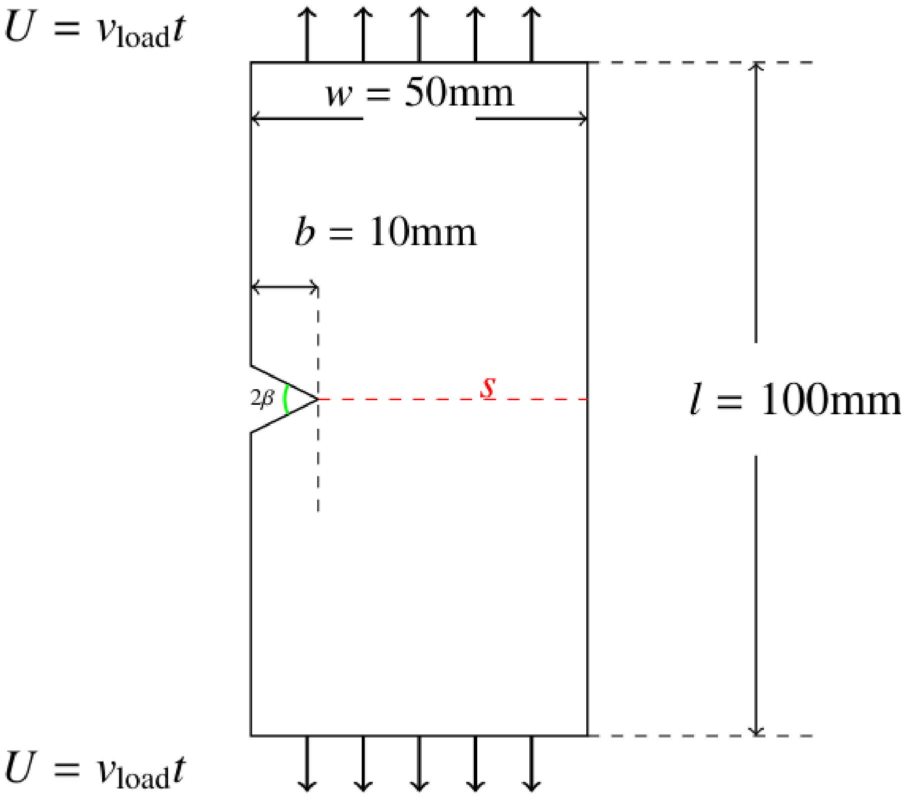
不同应变率下的应力-应变曲线

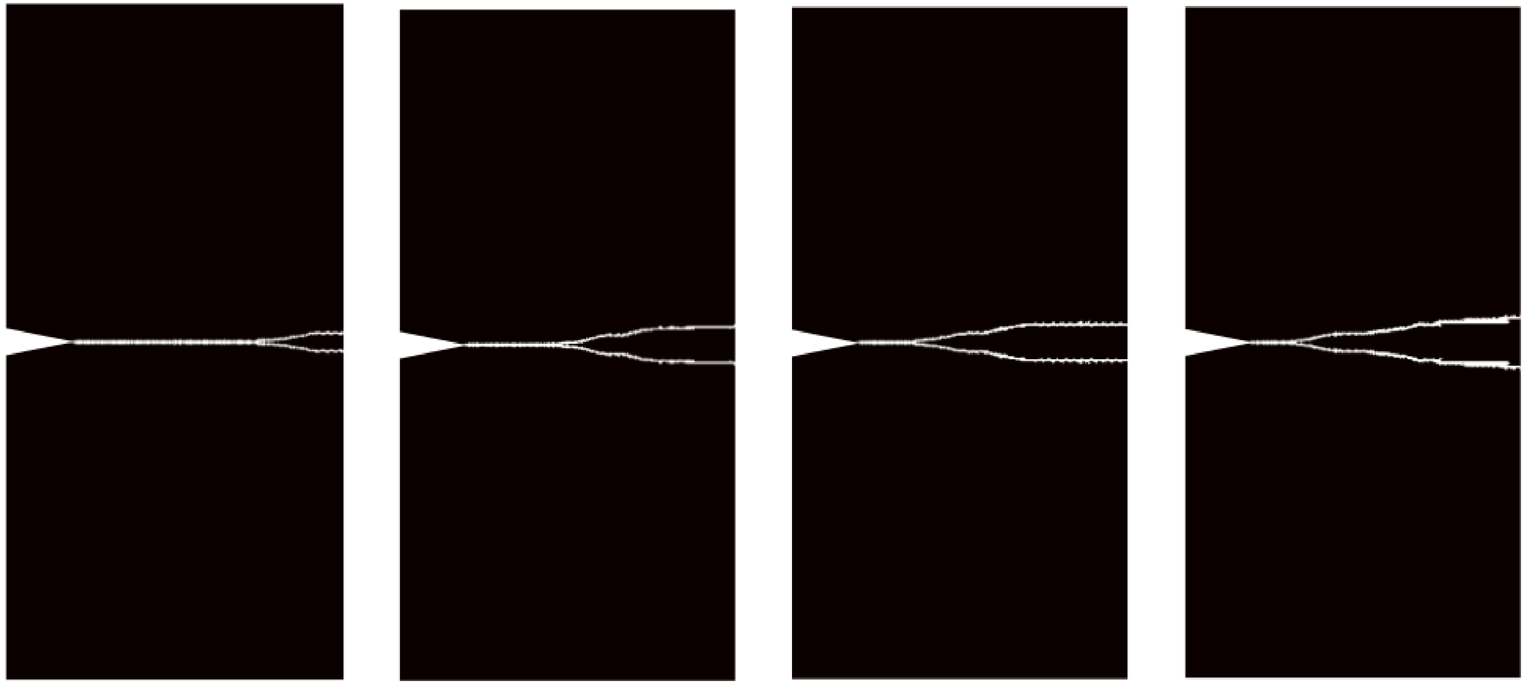


极限应力随微尺度的变化关系

数值结果（动态）

V型缺口单轴拉伸I型裂纹扩展的数值结果



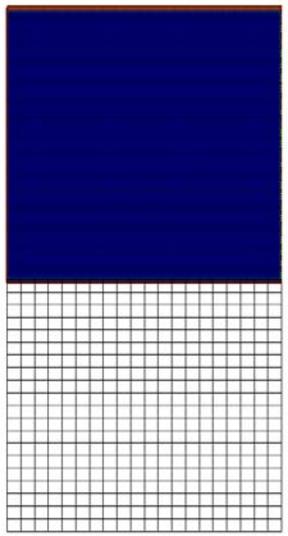


(a)$v_{\text{load}} = 1\text{m/s}$ (b)$v_{\text{load}} = 10\text{m/s}$ (c)$v_{\text{load}} = 20\text{m/s}$ (d)$v_{\text{load}} = 40\text{m/s}$

取不同的加载速度进行模拟，得到最终的断裂区。

数值结果（动态）

层裂现象的数值模拟



经典层裂现象

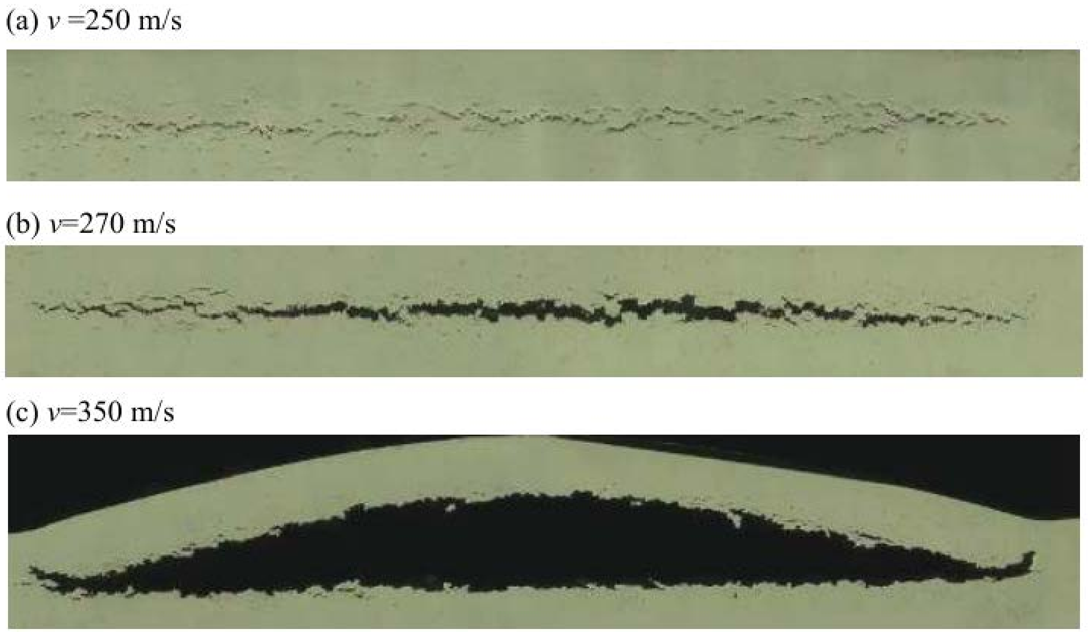


图 18　不同初始速度下的层裂剖面

【爆炸与冲击, 2019,39(7),073101】

层裂是指稀疏波叠加导致材料断裂的现象，它是爆炸冲击作用下的典型断裂破坏模式，也是认识**高应变率**下材料复杂动力学行为及其内在机理的重要手段。在武器研发，国防中均有重要应用。

数值结果（动态）

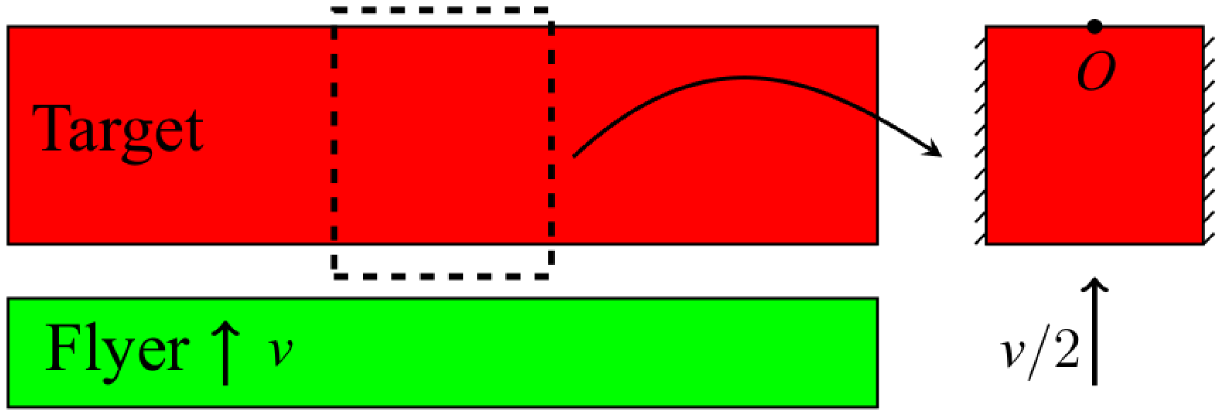
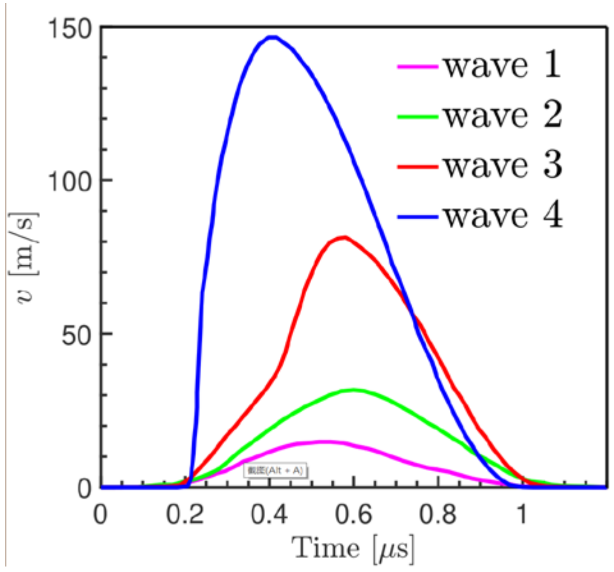
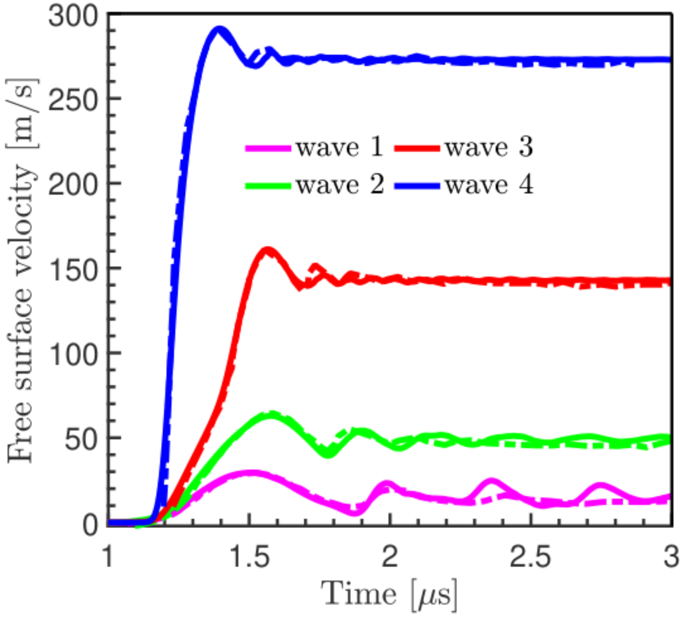


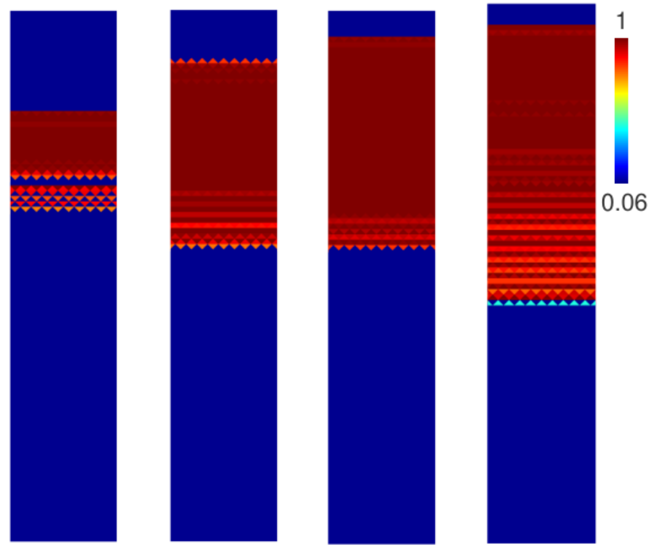
图 17: 冲击层裂简化模型.



四种冲击波加载

自由面速度曲线：计算（实线）VS. 实验（虚线） Zinszner, J., Erzar, B., Forquin, P., Buzaud, E., 2015

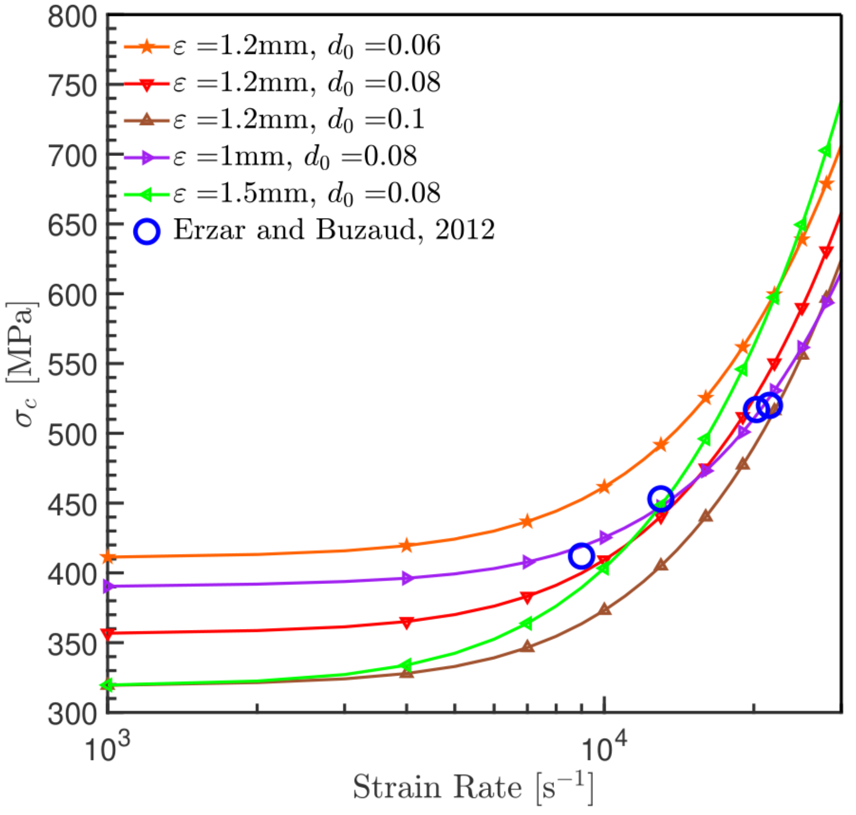




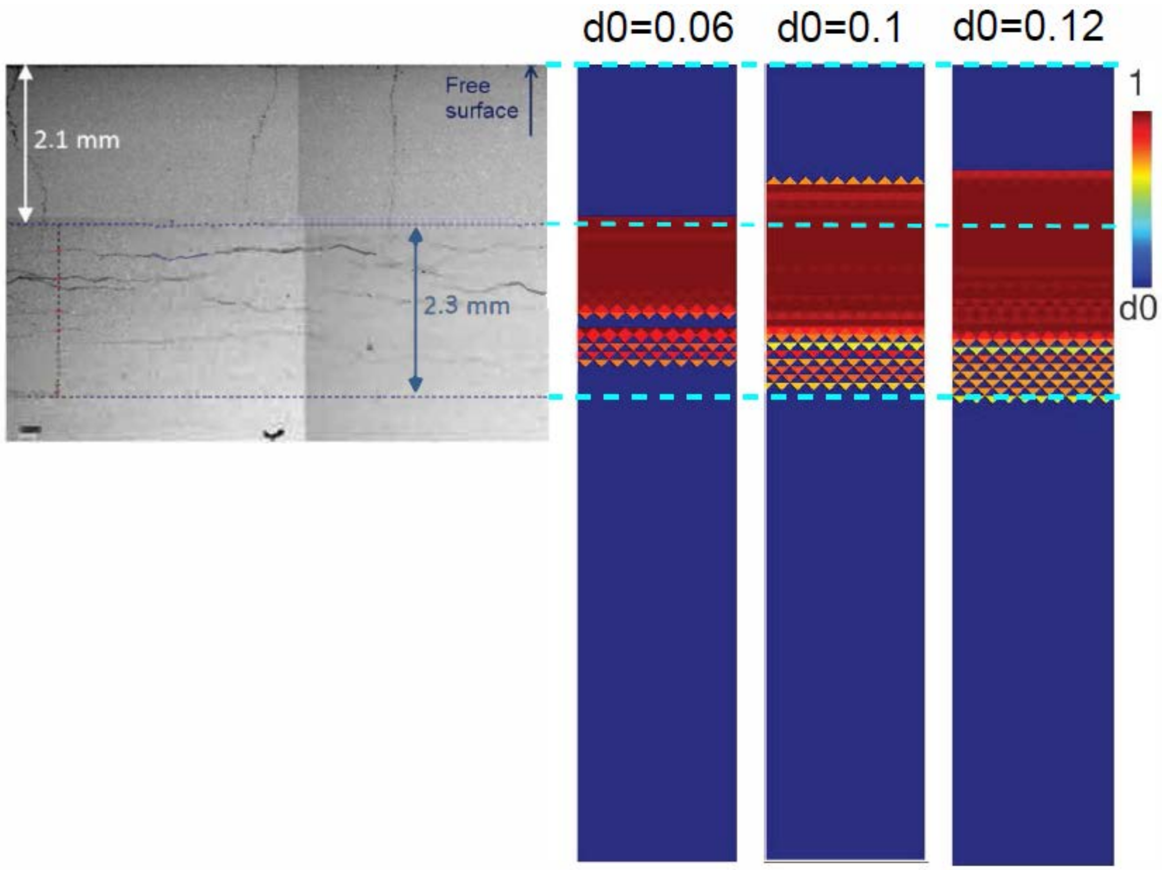
(a) wave 1 (b) wave 2 (c) wave 3 (d) wave 4

四种冲击波加载下最终损伤区的分布。

数值结果（动态）



层裂强度：计算VS.实验



层裂损伤区：计算VS.实验（ Zinszner, J., Erzar, B., Forquin, P., Buzaud, E., 2015 ）

总结与展望

总结

- 基于严格双尺度分析构建模型，没有引入任何的唯象参数；
- 自然地将材料的微结构参数（ε）、应变梯度效应、应变率效应引入到失稳准则。
- 数值模拟结果与现有实验结果可以较好的吻合。

展望

- 脆性材料扩展到韧性材料；
- 将微结构分布的随机性引入双尺度断裂模型中；
- 实际工程中，材料的断裂行为受温度影响，需要考虑热力耦合的断裂模型；
- 对于单胞中裂纹更复杂的分布形态和受力状态，需要建立混合型断裂准则。

谢谢大家！