

# 中国科学技术大学

# 博士学位论文



## 连续体损伤断裂与动力学失稳的 数值研究

作者姓名： 田富成  
学科专业： 核科学与技术  
导师姓名： 李良彬 研究员  
完成时间： 二〇二〇年五月二十四日



University of Science and Technology of China  
A dissertation for doctor's degree



# **Numerical Study on Damage Fracture and Dynamic Instability of Continuum**

Author: Fucheng Tian

Speciality: Nuclear Science and Technology

Supervisors: Prof. Liangbin Li

Finished time: May 24<sup>th</sup>, 2020



## 中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文,是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。除已特别加以标注和致谢的地方外,论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名: 田富成

签字日期: 2020.06.05

## 中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一,学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权,即:学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版,允许论文被查阅和借阅,可以将学位论文编入《中国学位论文全文数据库》等有关数据库进行检索,可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

公开      保密 (\_\_\_\_年)

作者签名: 田富成

导师签名: 李

签字日期: 2020.06.05

签字日期: 2020.06.05



## 摘要

理解连续介质的损伤断裂和动力学不稳定是力学和物理领域一个长期的挑战。随着计算机技术的飞速发展，数值模拟在当今的科学研究中起着至关重要的作用。近年来，一种叫做相场 (phase field method, PFM)的方法在处理复杂断裂方面显示出了非凡的能力。然而，该方法所需的高时空分辨率使得其数值计算相当苛刻。而且，以往的研究工作主要集中于脆性断裂方面。最近几年，关于大变形下断裂相场模拟的报道逐渐增加，但是也基本仅限于准静态断裂。据我们所知，至少在力学领域，有关相场建模与非线性弹性动力学耦合的研究屈指可数。在此背景下，我的博士工作首先是提出一系列原创的算法和模型以弥补现有算法和理论的不足。在奠定了方法学的基础之后，进一步的研究致力于揭示脆性/软材料中的高速断裂不稳定和极限裂纹速度的起源。在连续介质理论框架下，除了固体断裂之外，该论文的研究也扩展至非牛顿（粘弹性）流体的流体动力学不稳定。

**该博士论文的主要工作包括以下五个方面：**

(1) 为了降低断裂相场建模昂贵的计算开销，一种新型的混合自适应有限元相场法 (*ha*-PFM) 被提出。基于一个新颖的裂纹尖端识别策略，*ha*-PFM 可以动态地跟踪裂纹的传播并对网格进行自适应的细化与粗化。该方案显著降低了计算成本，例如 CPU 时间和内存占用等。与以往的自适应相场方法 (APFM) 相比，计算域的离散采用了一种新的多级混合三角形和四边形单元策略，从而消除了悬挂节点并确保裂纹尖端附近的网格是高度各向同性的。利用 *ha*-PFM 对几种包含准静态和动态断裂的基准算例进行了重新研究并且与采用均匀网格离散的相场模拟进行比较后，我们发现，*ha*-PFM 可以提速约 15~30 倍。

(2) 基于已开发的 *ha*-PFM，我们通过计算机模拟研究了聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 的动态脆性断裂。在没有任何先验假设以及附加断裂准则的情况下，数值模拟不仅成功地再现了实验中关键的裂纹特征，例如裂纹模式，速度演化以及极限裂纹速度，而且还发现了实验研究中尚未报道的断裂速度过冲等一些新特征。通过量化进入裂纹尖端的能量通量，我们提出了裂纹分叉遵循一个能量准则。基于这一准则，连续介质理论成功地预测了实验中捕捉到的裂纹的极限传播速度，揭示了裂纹分叉为裂纹传播速度设定了上限。结合裂纹分岔准则和连续介质理论，该研究为裂纹的复杂路径选择提供了合理的解释。

(3) 在脆性断裂基础上，我们首次提出了自适应边缘基平滑有限元 (ES-FEM) 框架下的大变形断裂的 Griffith 型相场格式。其中，ES-FEM 是 S-FEM 算法“家族”的优秀成员，其引入了无网格思想，相比 FEM，ES-FEM 具有较高的准确性，“较软的”刚度，并且对网格变形不敏感。鉴于此，该研究工作的亮点是将 PFM 和 ES-FEM 相结合，从而最大程度的释放两种方法的优势。考虑到 PFM 和 ES-FEM

的昂贵的计算开销，我们开发了一种设计良好的多级自适应网格策略，从而大大提高了计算效率（约 20 倍）。此外，我们详细阐述了 PFM 和 ES-FEM 耦合的数值实施。在此基础上，该工作重新计算了几个有代表性的数值算例，并与实验和文献结果进行了比较，验证了其有效性。需要特别指出的是，本研究首次再现了在橡胶断裂实验中的弱界面导致裂纹偏转。

(4) 对预应变超弹性材料断裂的数值实验表明，力学基的经典动态相场模型在非线性变形的框架内是不适用的。为了深入理解快速断裂的失稳，我们开发了一种以波速不变为特征的新型动态相场模型，从而使裂纹能够以接近渐近极限的速度传播。鉴于高速断裂的数值处理涉及极高的时空分辨率，因此，本研究采用稳健的显式动力学方法和高效的 *ha*-PFM，并提出了一种新颖的自适应畸变网格去除方案 (ADMR)，以解决大变形断裂中难以处理的有限元网格畸变问题。本研究给出了整个求解流程的详细数值实施，并通过两个准静态断裂基准验证了程序与算法的可靠性。利用所提出的新颖的模型和算法，成功地再现了超弹性凝胶断裂实验中捕获的超高速裂纹振荡和尖端劈裂失稳。

(5) 该工作采用著名的 Phan-Thien-Tanner (PTT) 微分粘弹性本构模型分析非等温薄膜流延的非线性稳定性和动力学。为了进行瞬态薄膜流延的数值计算，该工作首次在膜模型的控制方程中引入了粘弹性应力分裂 (DEVSS) 和 Streamline Upwind-Petrov Galerkin (SUPG) 算法。从而，可以在更大的聚合物熔体的加工和流变参数空间进行薄膜流延的稳定性分析。与 upper convected Maxwell (UCM) 模型所预测的结果不同，我们发现在临界拉伸比 ( $Drc$ ) 以上并不存在稳定区域。而在纵横比不同的情况下，我们在模拟中观察到多个  $Drc$  峰值，该峰主要受两种变形类型的影响：平面变形和过渡变形。我们的仿真结果表明，拉伸流变行为对拉伸增稠和拉伸稀化流体的流动稳定性起着主导作用，而诸如挤出速率和冷却等加工参数以及松弛时间等流变参数对  $Drc$  的影响都可以归因于拉伸粘度。

**关键词：** 连续介质力学，相场模型，急速断裂，动力学失稳，大变形，粘弹性



## ABSTRACT

Understanding the dynamic fracture and instability of continuous medium is an ongoing challenge in physics and materials science. With the rapid development of computer technology, numerical simulation plays a crucial role in current scientific research. In recent years, a method termed phase field method (PFM) has demonstrated extraordinary capabilities in dealing with complex fractures. However, the phase field modeling of fracture is computationally demanding, due to the high temporal-spatial resolution required for crack tracking. Besides, the vast majority of the previous reports concentrated on brittle fracture. The few reports on the phase field modeling of fractures at large deformations are also limited to quasi-static. To our knowledge, at least in the mechanics community, research related to the coupling of phase field modeling and nonlinear elastic dynamics is scarce. In this context, My PhD work exactly started by proposing some novel models and algorithms. After laying the foundations of the methodology, further research is committed to uncovering the physical origins of rapid fracture instability and limit crack velocity. In addition to solid fractures, the research in this thesis also involves the hydrodynamic instability of non-Newtonian fluids.

The research of this thesis is summarized in the following aspects:

(1) To cope with the expensive computational cost of phase field modeling of fracture, a novel hybrid adaptive finite element phase-field method (*ha*-PFM) is developed. *ha*-PFM can dynamically track the propagation of the cracks and adaptively refine (coarsen) the meshes based on a novel crack tip identification strategy. This scheme prominently reduces the computational cost, e.g. CPU time and memory usage. Unlike the previous adaptive phase field method (APFM), multi-level hybrid triangular and quadrilateral elements were developed to discretize the computational domain, which eliminates hanging nodes and ensures that the meshes in the vicinity of the crack tip are highly isotropic. Several representative benchmarks containing quasi-static and dynamic fracture were re-investigated with *ha*-PFM. Compared with the standard phase field method, it was found that *ha*-PFM can increase the speed by 15 to 30 times.

(2) Based on the proposed *ha*-PFM, we investigated the dynamic brittle fracture of poly (methyl methacrylate) (PMMA) through computer simulation. Without the explicit fracture criterion, current simulations not only successfully reproduced the crucial experimental observations on crack propagation, such as crack patterns, velocity evolutions and limit crack velocity but also discovered some new features not reported in the experimental study yet. Through quantifying the energy flux into the crack tip

and fracture energy, the long-standing challenge of limit crack velocity in experiments is successfully predicted by continuum theory, which unveils that crack bifurcation sets the upper limit for crack velocity. Combining the crack bifurcation criterion and continuum theory provides a rational explanation for complex path selection of cracks.

(3) With the groundwork of brittle fracture, this work presents the Griffith-type phase-field formation at large deformation in the framework of adaptive edge-based smoothed finite element method (ES-FEM) for the first time. The ES-FEM is an excellent member of the S-FEM family developed in combination with meshless ideas and finite element method (FEM), which is characterized by higher accuracy, ‘softer’ stiffness, and insensitive to mesh distortion. Given that, the advantages of the phase-field method (PFM) and ES-FEM are fully combined by the approach proposed in this paper. With the costly computational overhead of PFM and ES-FEM in mind, a well-designed multi-level adaptive mesh strategy was developed, which considerably improved the computational efficiency (about 20 times faster). Furthermore, the detailed numerical implementation for the coupling of PFM and ES-FEM is outlined. Several representative numerical examples were recalculated based on the proposed method, and its effectiveness is verified by comparison with the results in experiments and literature. In particular, an experiment in which cracks deflected in rubber due to impinging on a weak interface was firstly reproduced.

(4) Numerical experiments on phase field modeling of the fracture in hyperelastic materials reveal that the classical mechanical-based dynamic phase field model is ineffective in the framework of non-linear deformation. The aspiration to gain insight into rapid fracture instability motivated us to develop a novel dynamic phase field model characterized by wave velocity invariance, enabling crack propagation at a velocity approach to the asymptotic limit. Given that the numerical treatment of rapid fractures involves extremely high spatiotemporal resolution, robust explicit dynamics and a tried-and-tested *ha*-PFM are invoked. More crucially, an original adaptive distorted mesh removal scheme (ADMR) was developed to cope with the intractable finite element mesh distortion problem in large deformation fractures. The detailed numerical implementation for entire procedures is outlined, and its reliability is verified by two quasi-static fracture benchmarks. Utilizing the proposed model and innovative algorithms, the arresting ultrahigh-speed crack oscillation and tip-splitting instabilities captured in the fracture experiments of brittle gels were successfully reproduced.

(5) In this research, a well-known Phan-Thien and Tanner (PTT) differential

viscoelastic constitutive equation has been employed to analyze the nonlinear stability and dynamics of non-isothermal film casting. Finite element method (FEM) combined with stabilization techniques including discrete elastic viscous stress splitting (DEVSS) and streamline upwind Petrov-Galerkin (SUPG) were first performed for numerical calculation of transient film casting. Therefore, the stability analysis of film casting was carried out based on a wider parameter space of processing and rheological properties of the polymer melt. Unlike the results predicted by Upper-Convected Maxwell (UCM) model, the stabilizing region upon an upper critical draw ratio is nonexistent, while more than one peak of  $Drc$  was observed with varying aspect ratio, which was dominated by two deformation types named planar and transitional deformations, respectively. Our simulation results show that elongational rheological behavior plays a dominant role on the stability of flow for both extensional-thickening and extensional-thinning fluids, while the effects of processing parameters like extrusion rate and cooling, and rheological parameters like relaxation time on  $Drc$  all can be attributed to elongational viscosity.

**Key words:** continuum mechanics, phase field model, rapid fracture, dynamic instability, large deformation, viscoelasticity



第 1 章 绪 论 .....	1
1.1 引言 .....	1
1.2 连续介质力学的基本概念 .....	2
1.2.1 研究对象 .....	2
1.2.2 理论基础 .....	3
1.3 连续体断裂理论及其数值研究进展 .....	6
1.3.1 经典线弹性断裂力学 .....	6
1.3.2 动态断裂失稳研究进展 .....	8
1.3.3 断裂的变分相场模型研究进展 .....	11
1.4 非牛顿流体流动失稳的研究概述 .....	13
1.4.1 非牛顿流体 .....	13
1.4.2 奇异流变行为 .....	14
1.4.3 非牛顿流体流动失稳研究进展 .....	15
1.5 本论文的研究内容和意义 .....	17
参考文献 .....	20
第 2 章 脆性断裂的混合自适应相场方法 .....	29
2.1 引言 .....	29
2.2 断裂相场模型 .....	29
2.2.1 裂纹拓扑的相场描述 .....	29
2.2.2 脆性断裂的控制方程 .....	32
2.2.3 数值实施 .....	33
2.3 混合自适应相场方法的一般框架 .....	35
2.3.1 细化域识别策略 .....	35
2.3.2 多级混合自适应网格 .....	36
2.3.3 基本操作流程 .....	38
2.4 数值结果 .....	39
2.4.1 准静态断裂测试 .....	39
2.4.2 动态断裂测试 .....	44
2.5 小 结 .....	47
附录 四阶弹性张量的推导与代码实现 .....	48
参考文献 .....	50
第 3 章 动态裂纹分岔与极限速度起源 .....	53
3.1 引言 .....	53
3.2 理论模型 .....	54

---

3.2.1 相场模型.....	54
3.2.2 裂纹扩展速度.....	54
3.2.3 裂纹尖端的能量通量.....	55
3.3 材料参数.....	55
3.4 结果与讨论.....	56
3.4.1 预应变 PMMA 动态断裂.....	56
3.4.2 非均质材料中的裂纹扩展.....	58
3.4.3 弱界面中的裂纹传播.....	61
3.5 小结.....	62
3.6 附录 脆性钠钙玻璃的动态断裂.....	62
参考文献.....	64
第 4 章 有限形变断裂相场的光滑有限元建模.....	67
4.1 引言.....	67
4.2 有限形变下断裂相场格式.....	68
4.2.1 有限形变理论简介.....	68
4.2.2 超弹性模型.....	69
4.2.3 扩散裂纹的相场描述.....	69
4.2.4 控制方程.....	70
4.3 光滑有限元理论方面.....	71
4.3.1 应变光滑技术.....	71
4.3.2 ES-FEM 的构造.....	72
4.3.3 自适应网格方案.....	72
4.4 数值实施.....	73
4.4.1 伽辽金弱形式.....	73
4.4.2 线性化.....	74
4.4.3 基于 ES-FEM 的离散化.....	74
4.4.4 不可逆约束.....	76
4.4.5 求解流程.....	76
4.5 数值算例.....	77
4.5.1 具有可变长度缺口的双边拉伸试样.....	78
4.5.2 包含中心裂纹的平板断裂.....	80
4.5.3 含孔板的裂纹扩展测试.....	81
4.5.4 含界面的超弹性材料的裂纹偏转.....	82
4.6 小结.....	83
4.7 附录.....	84
参考文献.....	85

第 5 章 快速断裂中动力学失稳的相场模拟 .....	89
5.1 引言 .....	89
5.2 大变形动态相场模型 .....	90
5.2.1 扩散裂纹的相场近似 .....	90
5.2.2 动态断裂的非保守拉格朗日构造 .....	91
5.2.3 控制方程 .....	93
5.3 数值实施 .....	94
5.3.1 弱形式 .....	94
5.3.2 空间和时间离散 .....	94
5.3.3 线性化 .....	95
5.3.4 不可逆约束 .....	96
5.3.5 多级混合自适应网格 .....	97
5.3.6 自适应畸变网格移除策略 .....	97
5.3.7 预应变断裂的求解流程 .....	98
5.4 准静态测试验证 .....	99
5.4.1 非对称双边缺口拉伸测试 .....	99
5.4.2 多裂纹拉伸测试 .....	100
5.5 动态断裂不稳定 .....	101
5.5.1 预应变断裂配置 .....	101
5.5.2 经典模型的失效 .....	102
5.5.3 基于模型 P 的急速断裂预测 .....	103
5.5.4 两种模型的差异 .....	106
5.6 小结 .....	107
参考文献 .....	108
第 6 章 聚合物非牛顿流体的数值研究 .....	111
6.1 引言 .....	111
6.2 基本平衡方程 .....	111
6.2.1 连续性方程 .....	111
6.2.2 运动方程 .....	112
6.2.3 能量守恒方程 .....	113
6.3 非牛顿流体的本构模型 .....	113
6.3.1 广义牛顿模型 .....	113
6.3.2 粘弹性模型 .....	115
6.4 数值实施案例 .....	118
6.4.1 控制方程-膜模型 .....	118
6.4.2 稳定化算法 .....	120

---

6.4.3 空间-时间离散化.....	121
6.4.4 线性化.....	122
6.4.5 网格重划分.....	128
6.4.6 求解流程与验证.....	129
6.5 小结.....	130
参考文献.....	132
第7章 非等温薄膜流延的非线性稳定性分析.....	135
7.1 引言.....	135
7.2 材料参数.....	136
7.3 模型.....	137
7.3.1 数值模型.....	137
7.3.3 PTT 模型拉伸流变行为.....	138
7.4 结果与讨论.....	139
7.4.1 加工参数的影响.....	139
7.4.2 拉伸流变参数的影响.....	144
7.4.3 讨论.....	145
7.5 小结.....	147
参考文献.....	148
第八章 总结与展望.....	151
8.1 总结.....	151
8.2 展望.....	152
致 谢.....	155
在读期间发表的学术论文与取得的研究成果.....	157



# 第1章 绪论

## 1.1 引言

经历了近 200 年的发展,连续介质力学已经被证实是研究宏观固体和流体各种物理现象的一个极其强大的工具。基于连续介质理论发展起来的固体力学和流体力学都已经成为现代社会重要的基础学科。特别是工业制造,航空航天,军事,国防等关键领域,连续介质力学都发挥着举足轻重的作用。其中,一些比较极端的问题,如连续体的损伤断裂以及动力学失稳,不仅激起广泛的研究兴趣而且也是整个物理和力学学界长期存在的挑战。

首先,以材料的断裂问题为例,众所周知,断裂现象非常普遍。小到每天头发丝的断裂,大到飞机机翼的断裂,桥梁破坏,甚至地震等,这些都属于断裂力学的研究范畴。需要注意的是,断裂所导致的问题有可能是轻微的,比如一个玻璃杯的破碎,如图 1.1 (a) 所示。但是,也有可能引发巨大的灾难,如图 1.1 (b) 所示,1998 年德国一列列车因轮毂断裂发生的整车解体<sup>[1]</sup>。因此,深入地理解断裂问题不仅具有基础研究的兴趣也有实际应用的需求。目前来说,我们对简单裂纹的认识已经取得了相当大的进展。比如经典的线弹性断裂力学 (LEFM)<sup>[2]</sup>,其对于简单的裂纹预测,建立断裂准则以及设计更加安全稳定的结构提供了重要的指导。然而,对于更加复杂的断裂行为,特别是高速的动态断裂伴随裂纹的动力学失稳,如裂纹分叉,微分叉以及裂纹振荡<sup>[3, 4]</sup>等,现有的经典理论框架不再有效。事实上,迄今为此,我们对于动态断裂失稳的完整而全面的理解还远未建立。

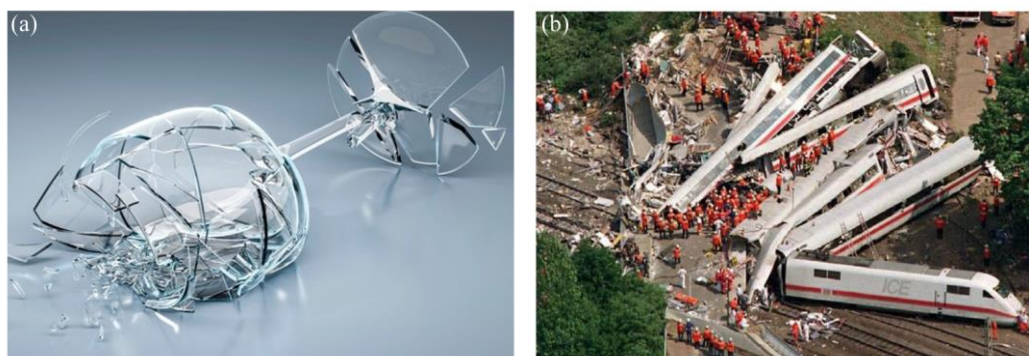


图 1.1 普遍的断裂现象: (a) 跌落而发生破碎的玻璃杯, (b) 由于轮毂断裂导致的列车解体事故<sup>[1]</sup>。

除了固体中涉及的断裂问题,流体动力学中有趣的流动不稳定现象是我们的另一个关注点。不同于固体,流体的流动属性使得其动力学行为更加复杂。如图

1.2 所示，我们展示了一些比较著名的流动不稳定现象，包括自然界中的波状云即 Kelvin–Helmholtz 失稳<sup>[5]</sup> (图 1.2 (a))，下落的水滴分裂的 Plateau–Rayleigh 失稳<sup>[6]</sup> (图 1.2 (b))，非牛顿流体流动的 Finger 失稳<sup>[7]</sup> (图 1.2 (c)) 以及吹膜加工中的 Helical 失稳<sup>[8]</sup> (图 1.2 (d))。当然，类似的流动不稳定现象还有很多，我们不可能在此一一展示。本论文我们主要关注的是聚合物非牛顿 (粘弹性) 流体的流动不稳定，如薄膜流延的拉伸共振失稳<sup>[9, 10]</sup>，以及基于连续介质理论的数值模拟。

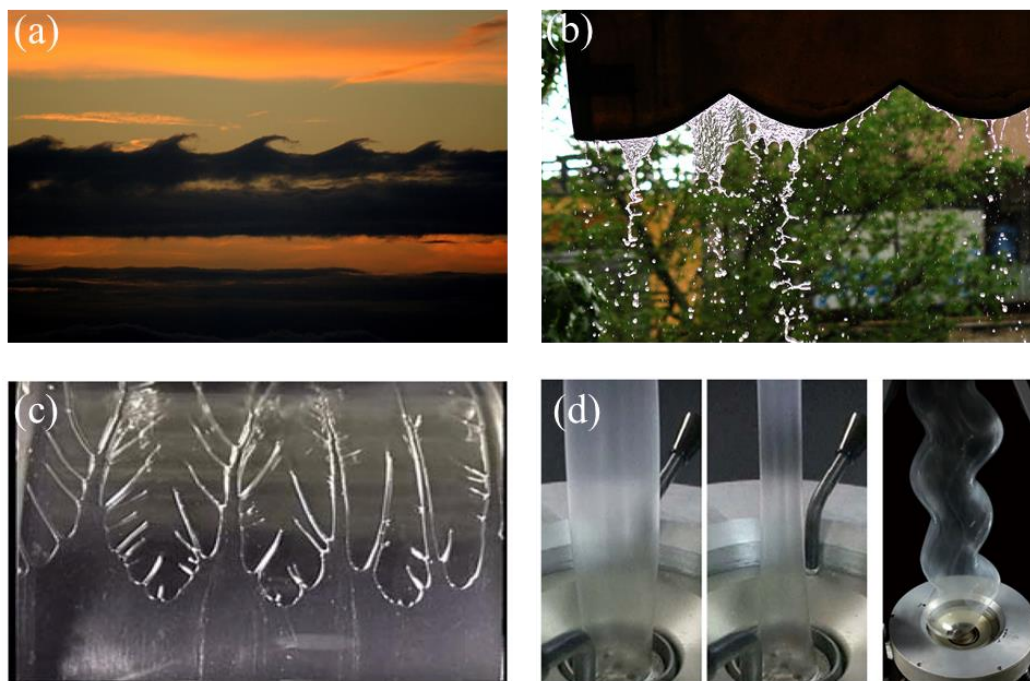


图 1.2 自然界以及工业加工中的各种流动不稳定现象。

作为该论文的绪论章节，我们将首先展开研究工作的背景并介绍一些最新的相关研究进展。本章第二部分（1.2 节）将首先介绍连续介质力学的研究对象和理论基础。在此基础上，1.3 小节将回顾经典的线性弹性断裂力学 (LEFM) 的发展。随后引出经典理论失效的动态断裂不稳定，并进一步总结相关的研究进展。此外，我们也简要介绍了先进的断裂数值策略-相场模型的发展。在 1.4 节，我们将介绍非牛顿流体的一些奇异流变行为，并总结了有关聚合物加工中粘弹性流体流动不稳定的研究进展。

## 1.2 连续介质力学的基本概念

### 1.2.1 研究对象

当在电子显微镜下观察，我们可以看到物质不连续的原子结构，而且粒子之间存在间隙。考虑这种真实的物质离散结构的理论有分子理论和原子理论，它们

都基于离散的粒子类方法。然而，对于宏观系统来说，这样的理论虽然真实，但是往往并不可行。事实上，很多实际的物理现象无需考虑物质的微观结构比如固体的宏观形变，流体的运动等等。在独立于原子和分子理论之外，有一套发展了近 200 年的理论-连续介质理论，正是为了处理各种宏观问题而生。而连续介质力学<sup>[11, 12]</sup>，正是基于连续介质假设，以张量分析为数学工具，其研究对象涉及固体以及流体的各种力学行为。

图 1.3 展示了连续介质力学的主要研究体系，包括两个庞大的学科：固体力学以及流体力学<sup>[13]</sup>。其中，固体力学的研究按照材料的力学响应又可以分为，弹性（线弹性和非线性弹性）和塑性两大类。而对于流体力学，按照材料类型可以分为：非牛顿流体以及牛顿流体两类<sup>[14]</sup>。而固体塑性和非牛顿流体又都属于流变学范畴。我们本文的研究属于连续介质力学框架，将跨越固体-流体，具体将涉及弹性体断裂以及非牛顿流体动力学失稳。然而，从连续介质角度来看，固体与流体并没有本质上的区别。



图 1.3 连续介质力学的研究体系。

## 1.2.2 理论基础

### (1) 构型

在连续介质力学中，我们考虑三维欧几里德空间中由一系列物质点  $\mathbf{P}$  所构成的连续体，称之为构型。如图 1.4 所示，在  $t=0$  时刻，未变形的连续体  $\kappa_0(\mathcal{B})$  被定义为初始（未变形）构型。而在  $t=t$  时刻，变形的连续体  $\kappa_t(\mathcal{B})$  为当前（变形）构型。

### (2) 运动学

在分析固体的运动或变形，以及流体的流动时，需要给定描述框架。一般考虑，对于固体，采用材料描述（即拉格朗日描述），而流体采用空间描述（欧拉描述）<sup>[15]</sup>。在材料描述中，物体的运动可以通过一个映射函数表示（如图 1.4）：

$$\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}) \quad (1.1)$$

从而，位移矢量可以写为：

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) - \mathbf{X} \quad (1.2)$$

固体中一般用位移描述连续体的运动和形变，而在流体中，一般用速度场和加速度场：

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t}, \quad \mathbf{a}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial^2 \chi(\mathbf{X}, t)}{\partial t^2} \quad (1.3)$$

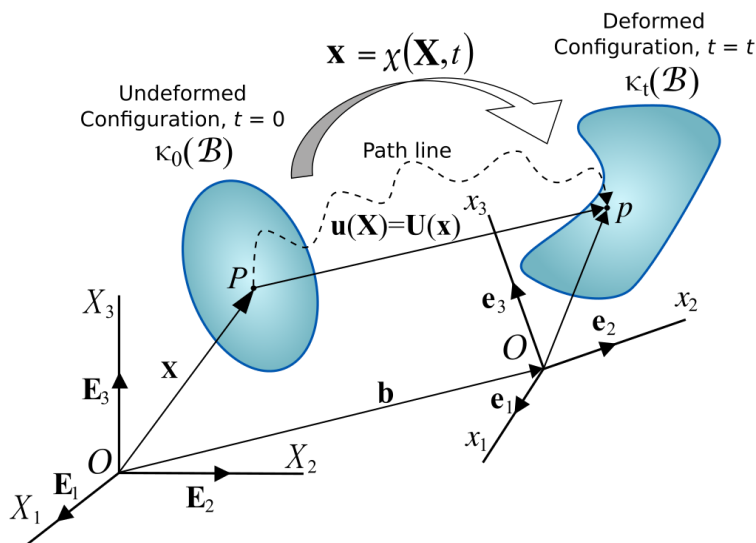


图 1.4 连续体的运动与形变的示意图<sup>[15]</sup>。

### (3) 变形梯度

为了建立初始构型和当前构型的联系，一个变形梯度定义为：

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \nabla_{\mathbf{X}} \mathbf{x} \quad (1.4)$$

考虑式 1.2，式 1.4 可以改写为：

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{x} = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \quad (1.5)$$

注意，变形梯度是连续介质力学的一个基本的定义，其用数学术语来说是雅可比矩阵：

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial X_1} & \frac{\partial x_1}{\partial X_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial X_1} & \frac{\partial x_2}{\partial X_2} \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

相应的雅可比行列式  $J(\mathbf{X}, t) = \det(\mathbf{F})$  建立了当前构型和初始构型的体积变化的联系，即：

$$dv = J(\mathbf{X}, t)dV \quad (1.7)$$

#### (4) 应变与应力度量

在连续介质力学体系下，一般考虑两种应变（应变速率）度量，即 Green 应变  $\mathbf{E}$ ，以及形变速率张量  $\mathbf{D}$ 。其中，格林应变定义为：

$$ds^2 - dS^2 = 2d\mathbf{X} \cdot \mathbf{E} \cdot d\mathbf{X} \quad (1.8)$$

通过一系列推导可以得到<sup>[15]</sup>：

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (1.9)$$

其中， $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$  为右柯西-格林形变张量。以位移梯度的形式  $\mathbf{E}$  可以表示为：

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{2} \left( (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T \right) \\ E_{ij} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial X_j} + \frac{\partial u_j}{\partial X_i} + \frac{\partial u_k}{\partial X_i} \frac{\partial u_k}{\partial X_j} \right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

在式 1.10 中忽略高阶项，就可以得到线弹性的柯西应变度量。

不同于格林应变，形变率张量  $\mathbf{D}$  是形变的率度量，其定义为：

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \quad (1.11)$$

其中  $\mathbf{L} = \nabla \mathbf{v}$  为速度的梯度。形变率张量在非牛顿流体计算中应用非常广泛，我们在第六章会重点讨论。

对于连续介质力学中的应力度量，一般考虑如下三种：柯西应力  $\boldsymbol{\sigma}$ ，第二 Piola-Kirchhoff (PK2) 应力  $\mathbf{S}$ ，以及名义应力  $\mathbf{P}$ 。关于三种应力的定义可以参考相关的连续介质力学书籍<sup>[16]</sup>，这里我们直接给出三种应力之间的相互转换关系：

$$\mathbf{S} = \mathbf{J} \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{F}^{-T} \quad (1.12)$$

在数值计算中，为了方便起见，使用哪种应力度量将取决于采用的构型以及本构方程的形式。但本质上，不同的应力度量都可以相互转换。

#### (5) 材料时间导数以及 Reynolds 定理

在欧拉描述下，速度一般表示为空间坐标的形式，相应地，材料时间导数可以通过链式法则导出为：

$$\frac{D\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (1.13)$$

而对于如下包含密度  $\rho$  和函数  $f$  乘积的积分的材料时间导数，我们又可以得到：

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho f d\Omega = \int_{\Omega} \rho \frac{Df}{Dt} d\Omega \quad (1.14)$$

这被称之为 Reynolds 定理<sup>[15]</sup>，其在流体力学中常常被使用。

#### (6) 守恒方程

任意连续体包括固体和流体，均遵循三个基本守恒方程（质量，动量和能量）<sup>[12, 15, 17]</sup>。正如前面指出的，对于固体和流体，我们通常采用不同的构型描述。在

拉格朗日描述下，固体的守恒方程可以导出为：

$$\rho J = \rho_0 \quad (1.15)$$

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \mathbf{P} + \rho_0 \mathbf{b} \quad (1.16)$$

$$\rho_0 \frac{Dw_{\text{int}}}{Dt} - \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho_0 s = 0 \quad (1.17)$$

其中， $w_{\text{int}}$  为单位质量的内能， $\mathbf{q}$  是热流矢量， $s$  为单位质量的能量源。

在欧拉描述下（基于空间坐标），流体的基本控制方程可以导出为：

$$\dot{\rho} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.18)$$

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} \quad (1.19)$$

$$\rho \frac{Dw_{\text{int}}}{Dt} - \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho s = 0 \quad (1.20)$$

## 1.3 连续体断裂理论及其数值研究进展

### 1.3.1 经典线弹性断裂力学

#### (1) 临界能量释放率

断裂力学最初的发展是在第一次世界大战期间。1920年，英国工程师 Griffith<sup>[18]</sup>受 Inglis<sup>[19]</sup>对椭圆孔的线弹性解的启发，发表了一篇基于能量的裂纹分析文章，这被普遍认为是断裂力学诞生的标志。从热力学的角度出发，Griffith 基于包含裂纹的无限大平板的单轴拉伸场景导出了材料的临界应力<sup>[18]</sup>：

$$\sigma_f = \sqrt{\frac{G_c E}{\pi a}} \quad (1.21)$$

其中， $E$  为杨氏模量， $a$  为裂纹长度，而  $G_c$  就是临界的能量释放率。该理论相当简洁，但是在玻璃等脆性材料的断裂临界应力预测方面却表现十分优异。然而，在韧性断裂中，该理论需要一些简单的修改，Irwin 等人<sup>[20]</sup>提出，对于韧性材料，如金属等，临界能量释放率还需要考虑塑性能量耗散。

#### (2) 应力强度因子

应力强度因子是由被称为“断裂力学之父”的 Irwin 在 1957 年提出的<sup>[20]</sup>。应力强度因子简称为 SIF，用变量  $K$  表示。SIF 是断裂力学中最基本且最有用的参数之一。SIF 描述了裂纹尖端处的应力状态依赖于裂纹的扩展速率，可用于建立断裂破坏准则。此外，SIF 与前面提及的临界能量释放率还存在如下关系：

$$K_c = \sigma_f \sqrt{\pi a} \quad (1.22)$$

结合式 1.21 和 1.22 可以得到

$$G_c = \frac{K_c^2}{E} \quad (1.23)$$

其中  $K_C$  是临界应强度因子。注意式 1.23 可以推广到一般情况。但是，如果考虑平面应力和平面应变情况，式 1.23 需要进行简单修正（平面应变： $G = K^2 / E'$ ，其中  $E' = E / (1 - \nu^2)$ ）。

### (3) 三种断裂模式

一般情况下，对于物体的加载可以施加在任意方向上。一个容易想到的方法是把力分成几个基本的分量。这一过程产生了如图 1.5 所示的三种加载模式，即 Model I-张开加载，Model II-平面内剪切加载，Model III-平面外剪切加载（撕开型）<sup>[2]</sup>。其中，Model I 由于其损害性最大，所以相关的研究也最为广泛。

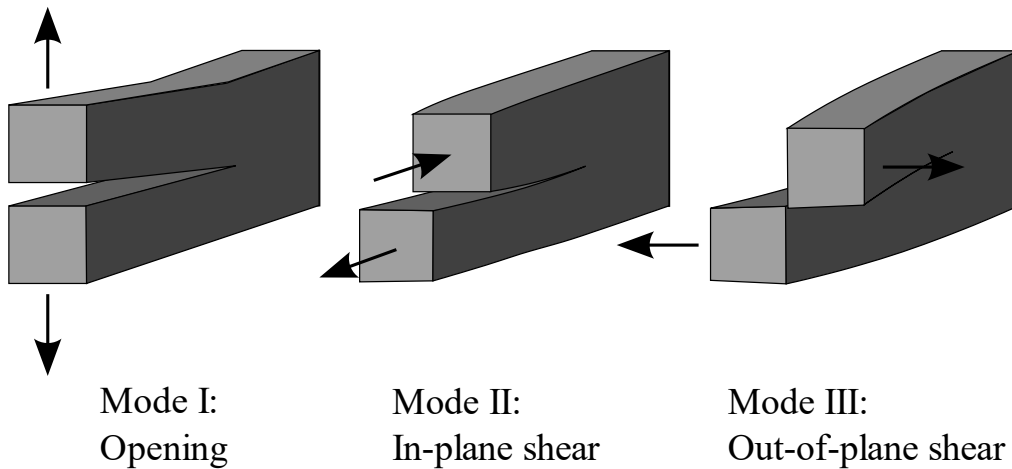


图 1.5 三种基本的加载模式。

### (4) 简单裂纹动力学

第一个裂纹运动方程是由 Mott<sup>[21]</sup>通过量纲分析得到的。该方程预测，在无限延伸的二维介质中，裂纹速度应不断加速，并最终达到有限的渐近极限速度。裂纹的这种速度限制是由于能量运输的物理约束。裂纹尖端需要能量才能扩展。如果这种能量必须由弹性波从介质中较远的部分传送到裂纹尖端，那么裂纹的速度一定会受到这些波传播速度的限制<sup>[22, 23]</sup>。这种渐近极限可以通过增加驱动裂纹的能量或将断裂能量  $\Gamma$  降为零来实现。Stroh<sup>[24]</sup>注意到当  $\Gamma \rightarrow 0$  时，裂纹的传播相当于沿自由表面移动的扰动，因此，他预测 I 型断裂裂纹的极限速度应是波沿自由表面传播的最高速度，瑞利波速  $V_R$ （注意：一些预应变状态下的剪切断裂可能出现超音速裂纹，这不在我们的研究范围）。

这一直观的想法被随后发展的动态断裂理论证实是正确的<sup>[22, 25, 26]</sup>，这一完整的理论正是 LEFM。假设介质遵循线弹性，该理论预测了裂纹尖端奇异应力的一般形式为：

$$\sigma_{ij} = \frac{K}{\sqrt{r}} f_{ij}(v, \theta) \quad (1.24)$$

其中,  $f_{ij}(v, \theta)$  是一个通用函数,  $K$  通过外载荷计算, 其与能量释放率  $G$  有关, 即:

$$G = (1 - \nu^2) K^2 A(v) / E \quad (1.25)$$

其中,  $E$  为弹性模量,  $\nu$  为泊松比,  $A(v)$  为瞬态裂纹速度的函数。利用能量平衡即:  $G = \Gamma$ , 就可以得到裂纹的运动方程。然而, 这一能量平衡并不能预测裂纹的路径。为此, 一个名为局部对称原理的假设被提出<sup>[27,28]</sup>。该假设指出, 裂纹在运动过程中将局部对准一个方向, 从而抵消其尖端的任何剪切分量。对于缓慢的准静态断裂, 这一想法已经可以用于定量的描述裂纹运动。虽然这一假设也常用于快速断裂, 但是并没有相关的实验或理论基础。

基于无限大平板上的半无限裂纹模型, Freund<sup>[22]</sup>进一步导出了如下简洁的裂纹运动方程:

$$v = V_R \left[ 1 - \frac{\Gamma E}{(1 - \nu^2) K^2(l)} \right] \quad (1.26)$$

这与在无限大板上进行量纲分析得到的裂纹运动方程是一致的。

然而, 基于 LEFM 导出的这个方程并不总是成立的, Sharon 以及 Fineberg 等人<sup>[3,29,30]</sup>的一些实验表明, 只有在满足一些假设的条件下, LEFM 的结果才是有效的。Bouchbinder 等人<sup>[31]</sup>对此进行了总结, 这些假设如下:

- (1) 只考虑单裂纹状态。一旦出现更复杂的动态裂纹 (例如, 裂纹分叉), LEFM 就不能准确地预测它们的行为。事实上, 目前还没有一个定理可以确定一条断裂必须走哪条路。
- (2) LEFM 对远离裂纹尖端的地方有效。原则上, 样品需要足够大。
- (3) 小尺度屈服。也就是说, 所有的非线性形变/耗散只发生在裂纹尖端一个可忽略的尺度内 (这一假设可能并不合理)。
- (4) 一个默认的假设: 能量必须流入裂纹尖端, 否则裂纹无法扩展。

### 1.3.2 动态断裂失稳研究进展

上一小节我们简单概述了经典的 LEFM。对于一个单裂纹, 我们可以通过能量平衡建立其运动方程。但是, 这并不是断裂的一个完整图像。一系列脆性材料的实验表明, 当裂纹的速度达到一个临界值  $v_c \approx 0.4V_R$ , 单裂纹将失去稳定性, 一种名为微分叉的不稳定开始发生<sup>[3,29,32]</sup>。通过将试样的厚度变薄, 微分叉不稳定可以被抑制。然而, 基于脆性凝胶的实验, 在裂纹速度  $v_c \approx 0.9V_R$  时, 观测到一



种新的超高速的裂纹振荡失稳<sup>[4,33,34]</sup>。对于这些丰富的动力学现象,经典的 LEFM 无法给出解释。下面我们将从这两种重要的不稳定现象出发,来介绍相关的动态断裂失稳的研究进展。

### (1) 微分叉失稳

LEFM 理论预测表明: 裂纹可以加速达到其渐近极限速度<sup>[22, 23]</sup>,  $V_R$ 。但是, 实验表明<sup>[23, 29, 35, 36]</sup>, 脆性材料中裂纹的速度很少能够超过  $0.6 V_R$ 。这些观察结果表明, 我们对快速裂纹动力学的基本理解出现了严重错误。对于这一明显的偏差, 答案是: 在高速时, 裂纹不再是“简单裂纹”。相反, 正如 Ravi-Chandar 和 Knauss 等人<sup>[37, 38]</sup>首次在实验中观察到的, 高速传播的裂纹结构与图像中所描述的简单裂纹完全不同。高速照片显示, 快速裂纹不再是由单个简单裂纹扩展而成的, 而是由同时扩展的裂纹群组成的。之后, Fineberg 等人<sup>[29, 35, 39, 40]</sup>的实验进一步表明, 一个简单的裂纹以一个临界速度分裂成多个裂纹, 在这个临界速度下, 单个裂纹变得不稳定。这种不稳定性被称为“微分叉”不稳定。这一特征在许多非晶材料中都被发现<sup>[35, 37, 39, 41]</sup>。

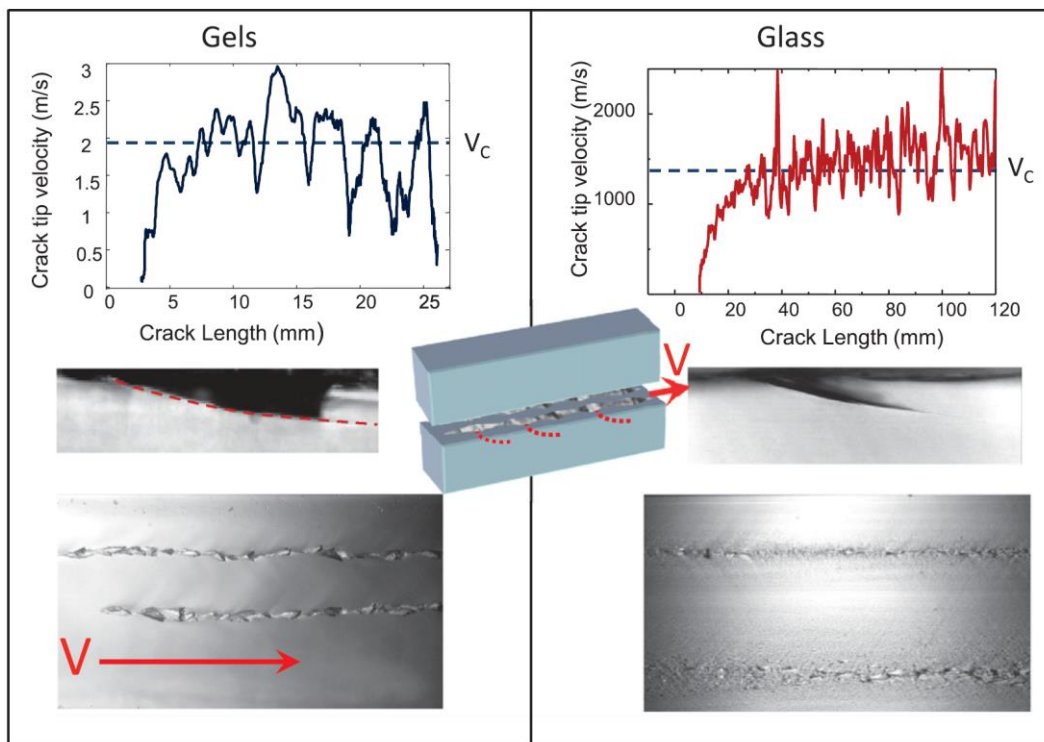


图 1.6 裂纹微分叉失稳发生时的裂纹表面以及对应的裂纹传播速度<sup>[3]</sup>。

在低速断裂时, 断裂表面光滑如镜。当达到一个临界速度  $v_{mb} \approx 0.4V_R$ , 瞬时裂纹速度出现快速波动, 同时在断口表面出现非平凡结构(受阻的多重微裂纹分支), 如图 1.6 所示<sup>[3]</sup>。当裂纹速度增加到超过  $v_{mb}$  时, 微分支的长度和密度都随  $v$  的增加而增加, 这相应地导致更粗糙的断裂表面特征, 更大的速度波动以及断

裂能的急剧增加（与总的裂纹分枝成正比）。而且，图 1.6 表明，这种特征并不依赖于具体哪种脆性材料，其在钙-钠玻璃<sup>[42-44]</sup>以及聚丙烯酰胺凝胶<sup>[35, 40]</sup>中都被观测到。

在过去的近 30 年里，已经有很多工作试图通过各种方式补充或扩展 LEFM 来描述微分支的不稳定性<sup>[45-49]</sup>。也包括一些数值模拟，比如，相场模型 (PFM)<sup>[45, 46, 50, 51]</sup>，内聚区模型(CZM)<sup>[52-54]</sup>，格子模型<sup>[55, 56]</sup>等。尽管这些模型中有许多表现出与实验观察结果定性一致，但它们本质上都是有缺陷的，因为它们专注于 2D 裂纹分叉（也就是说，它们实际上研究的是宏观分支，它表现为一种裂纹尖端不稳定）。而微分支本质上是一种三维不稳定性，无法在二维描述下被合理的解释。此外，在理论层面上，最近的一些实验研究表明，要想完全理解这种不稳定性，可能需要引入新的物理成分（例如长度尺度）<sup>[3, 4]</sup>。其中，在 LEFM 理论中缺失的靠近裂纹尖端的小尺度被认为对裂纹的稳定性起着关键的作用<sup>[3, 29]</sup>。

## (2) 振荡失稳

正如我们前面提到的，通过操纵试样的几何形状和厚度，有可能抑制微分叉不稳定的发生<sup>[3]</sup>。当微分叉失稳被抑制时，简单的脆性裂纹有望达到一个极高的扩展速度。然而，实验结果显示这并不顺利，一个新的不稳定-裂纹振荡失稳发生了<sup>[3, 4, 33, 34, 47]</sup>，如图 1.7 所示。在  $v_c \approx 0.9V_R$  时，一个直裂纹开始失去稳定性，并发生类似正弦的路径振荡，这种不稳定性是特别有趣的，因为它涉及一个有限的振荡波长，其值不依赖于系统的几何尺寸或加载条件。由于在无尺度的 LEFM 中不存在一个固有尺度，因此，经典 LEFM 理论无法对此做出合理解释<sup>[34, 57]</sup>。

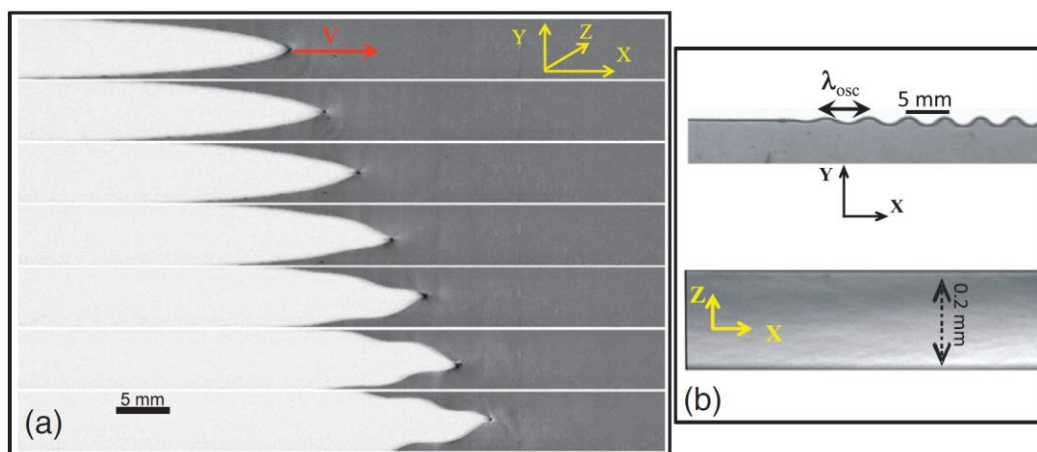


图 1.7 (a) 振荡失稳的裂纹轮廓，(b) 光滑的断裂表面<sup>[3]</sup>。

为了处理这个问题，Fineberg 等人提出了一个新的弱非线性理论<sup>[57]</sup>。他们在动态裂纹的运动方程中引入了一个新的长度尺度  $\ell_m$ 。首先，考虑一个 2D 几何上的裂纹，其路径由  $\mathbf{r}^{tip}(t)$  描述，且其尖端由非线性尺度  $\ell_m$  包围，如图 1.8 所示。

其中,  $\mathbf{t}$  和  $\mathbf{n}$  分别表示裂纹尖端的切向量和法向量。假设一个各向同性材料, 其与裂纹生长相关的方程根据图 1.8 可以直接写为:

$$\partial_t \mathbf{r}^{tip} = v(K_I(t), K_{II}(t))\mathbf{t} \quad (1.27)$$

裂纹尖端的旋转可以描述为:

$$\partial_t \mathbf{t} \approx -\frac{v}{\ell_{nl}} K_{II}(t)\mathbf{n} \quad (1.28)$$

其中,  $K_I$  和  $K_{II}$  分别对应于 I 和 II 型断裂模式的 SIF。方程 1.28 可以重写为切线与 x 轴夹角  $\theta$  的格式, 即<sup>[3,4]</sup>:

$$\partial_t \theta(t) \approx -\frac{v}{\ell_{nl}} \frac{K_{II}(t)}{\bar{K}_c} \quad (1.29)$$

其中 特征应力强度因子定义为  $\bar{K}_c \sim \sqrt{E\Gamma}$ 。需要注意的是, 式 1.29 并没有给出任何关于  $\ell_{nl}$  起源的明确的信息。一些定性的对比发现, 振荡波长依赖于  $\ell_{nl}$ 。这是一个重要的预测, 表明了高速振荡不稳定性的存在是由内在时间和长度尺度控制的, 与裂纹尖端附近的 LEFM 的失效有关。至于  $\ell_{nl}$ , 它可以表示线性弹性分解的尺度, 可以是非线性弹性分解, 也可以是耗散过程分解, 这些都还有待未来的实验验证。

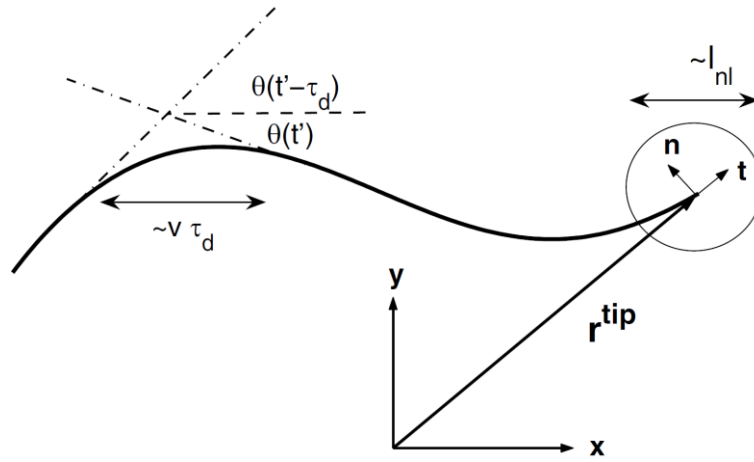


图 1.8 带有尺度为  $\ell_{nl}$  大小的非线性区裂纹路径演化<sup>[57]</sup>。

以上提及的两种断裂不稳定无法在经典的 LEFM 框架下得到合理的解释, 目前的一些尝试也没有揭示这些不稳定的物理起源。最近的一些采用相场模拟的工作表明<sup>[50,51]</sup>, 裂纹尖端的非线性尺度和耗散尺度是必要的。

### 1.3.3 断裂的变分相场模型研究进展

断裂是材料失效的主要形式之一, 而且其发生往往是灾难性的。因此, 了解材料的断裂行为在工业和工程领域非常重要, 在这之中, 数值模拟起着至关重要

的作用<sup>[58]</sup>。迄今为止，已经开发出多种方法（或模型）来模拟断裂过程，所有这些都大致可分为两类，即不连续（尖锐界面）方法和连续（弥散）方法<sup>[59]</sup>。前者需要对不连续位移场进行数值跟踪，例如，扩展有限元方法（XFEM）<sup>[60-63]</sup>、内聚区模型（CZM）<sup>[52-54]</sup>，扩展等几何分析（XIGA）<sup>[64-67]</sup>等。然而，对于离散方法而言，复杂的裂纹模式跟踪（如分支和合并）仍然是一个艰巨的任务。考虑到这一点，一种替代方法被发展，即连续方法。在这类方法中，尖锐的裂纹表面拓扑结构通过一个薄的裂纹扩散区来调整，并由辅助标量场代替，从而避免了对不连续裂纹的跟踪。得益于上述优势，连续方法在最近的十多年中得到了广泛的应用<sup>[68-72]</sup>，其中相场方法（PFM）是最有前景的方法之一。如图 1.9 所示，PFM 通过引入  $[0,1]$  的标量场即相场来正则化离散的裂纹，从而避免了对不连续裂纹的跟踪。得益于上述优势，PFM 在最近的十多年中得到了广泛的应用<sup>[68-72]</sup>，本文关于断裂的数值模拟也将采用这种模型。

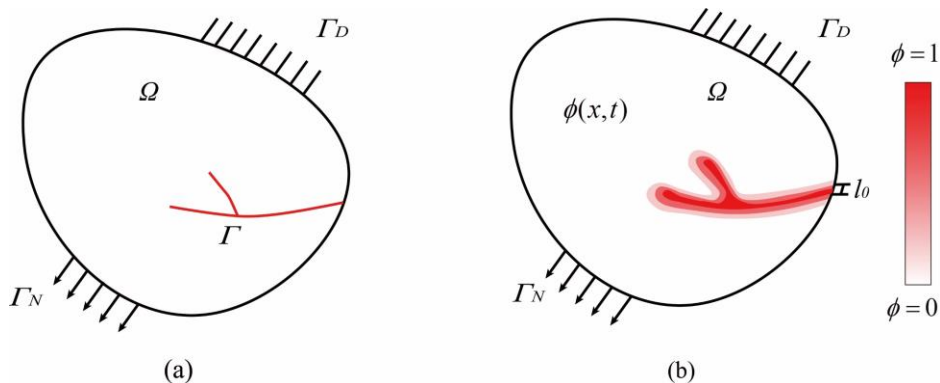


图 1.9 断裂相场模型的示意图：(a)离散裂纹，(b)扩散裂纹。

目前，物理和力学学界已经独立开发和研究了各种不同的脆性断裂的相场方法。不过，两个学界的相场演化方程的概念和技术背景有很大的不同。在物理学界发展起来的动态相场模型，其以 Ginzburg-Landau 方程控制的相变机制为基础<sup>[45, 46, 50, 51, 73, 74]</sup>。本文主要关注的是力学学界的相场模型。固体力学中的断裂相场模型最早可以追溯到上世纪 90 年代末期由 Francfort 等<sup>[69]</sup>所提出的断裂变分理论。随后，Bourdin 等人<sup>[75, 76]</sup>对变分相场模型进行了正则化以进行数值求解。在过去的十多年中，大量的研究者付出了不懈地努力以完善相场方法<sup>[71, 77-81]</sup>。在众多研究中，Miehe 等人<sup>[78, 79]</sup>提出了一项杰出的工作，他们在热力学的框架内重新制定了相场模型，以克服原始模型的缺点。在 Miehe 的模型中<sup>[79]</sup>，拉伸和压缩变形对断裂的贡献通过应变张量的谱分解得以区分，从而阻止了受压过程中不切实际的裂纹扩展。此外，他们引入了一个局部的应变历史场以确保裂纹的不可逆生长，并提供了非常适合数值实现的版本。与之不同地，Amor 等人<sup>[82]</sup>引入了一种替代方法，通过将总弹性应变能分解为体积贡献和偏差贡献来抑制压缩下的裂纹

传播。为了降低上述分解算法的复杂性, Ambati 等人<sup>[83]</sup>提出了一种混合相场公式, 大大降低了计算开销。尽管 PFM 主要用于脆性断裂计算, 但 Hesch 和 Miehe 等人<sup>[84, 85]</sup>已经成功地将这种方法用于有限形变断裂问题。此外, 研究人员还进一步将 PFM 扩展到韧性, 超弹性断裂的相场建模<sup>[86-89]</sup>和加压断裂的广阔领域<sup>[77, 90, 91]</sup>, 近年来它们已成为计算断裂力学的研究重点, 相关的综述可以参考 Ambati<sup>[83]</sup>和吴等人<sup>[92]</sup>的工作。

正如 Cox 等人<sup>[93]</sup>所说, “动态断裂问题是断裂科学中最基本的问题”。鉴于准静态模型无法捕获快速载荷下的复杂断裂模式, 如裂纹振荡<sup>[33]</sup>, 因而开发动态相场演化模型则至关重要。Borden 等人<sup>[94]</sup>对此做出了很大贡献, 他们利用能量泛函的变分原理(哈密顿原理)将准静态相场模型扩展到动态情况。基于该模型, Miehe 等人<sup>[95]</sup>在动载荷作用下展示了复杂的裂纹形态。Bleyer 等人<sup>[96]</sup>采用动态相场模型研究了裂纹的分叉和增韧机理。值得注意的是, Ginsburg-Landau 型相场模型最初就是在动态条件下推导的。在这种情况下, Karma 等人<sup>[45, 46, 97]</sup>完美地再现了许多复杂的断裂现象。需要指出的是, 虽然相场模型在模拟复杂裂纹方面具有优势, 但是, 其函数非凸性以及所需的精细网格, 使得其计算相当苛刻<sup>[98-105]</sup>。为此, 一部分工作集中在自适应网格以及求解算法方面<sup>[98, 106-108]</sup>。本文的第二章正是为此而开发的一个混合自适应网格算法<sup>[109]</sup>, 其相比标准的 PFM 可以提高计算效率 15~30 倍。基于新的自适应网格算法, 我们的研究重点将会放在动态断裂不稳定方面。

## 1.4 非牛顿流体流动失稳的研究概述

### 1.4.1 非牛顿流体

正如我们在 1.2 节所述, 连续介质力学的研究对象包括固体和流体, 而流体又可以分为牛顿流体和非牛顿流体。首先, 我们给出牛顿流体的定义。牛顿流体的流动特性表现为: 剪切应力与剪切应变遵循线性关系<sup>[110]</sup>。大多数低分子量流体, 比如有机或无机液体、低分子量无机盐溶液、熔融金属以及气体等都表现出牛顿流动特性。凡是不遵循牛顿流体特性的流体都是非牛顿流体。这类流体事实上更加广泛, 比如日常生活中常见的奶油, 蜂蜜, 牙膏, 淀粉悬浮液, 油漆, 沥青, 血液, 以及我们所关注的聚合物熔体<sup>[14, 111]</sup>。由于特殊的非牛顿属性, 此类流体常常表现出奇特的流动特性, 比如聚物流体中常见的爬杆效应, 挤出胀大, 无管虹吸现象等<sup>[112]</sup>。

## 1.4.2 奇异流变行为

本节我们将简单介绍几种非牛顿流体的奇异流变行为，以展示其与牛顿流体的区别。

### (1) 爬杆效应

当一个杆在聚合物熔体/溶液中旋转时，流体就会沿着杆进行爬升。这种现象被称为爬杆效应<sup>[112]</sup> (如图 1.10)。爬杆效应实质上是由于非牛顿流体中存在能够支持沿流线的张力 (非零的法向应力差性质)，这将迫使流体沿着杆向上爬升。此外，这种效果也可以在没有杆的情况下发生：如果我们旋转烧杯底部的圆盘，那么自由表面就会在中间凸起。

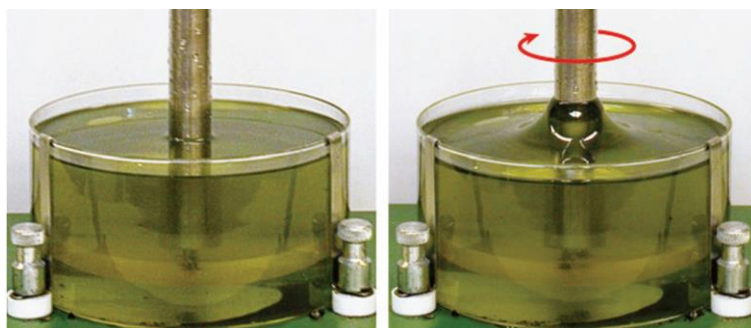


图 1.10 聚合物溶液中的爬杆效应<sup>[113]</sup>。

### (2) 挤出胀大

挤出胀大是聚合物加工一个非常常见的现象。其表现为，当聚合物熔体被迫通过模具，在离开模具之后，部分恢复或膨胀回原来的形状和体积。造成这一现象的主要机制是第一法向应力差<sup>[112]</sup>。Tanner 等人<sup>[114]</sup>对挤出胀大现象做了一系列数值分析，并总结了一些经验公式。事实上，实验中发现，挤出胀大的程度非常依赖于加工过程，如图 1.11 所示，在低速挤出时，胀大现象比较弱，而在高速挤出时，胀大现象更加明显，关于其微观的解释需要考虑聚合物的熵和松弛过程，这些已经超出本文的研究范畴，我们在此不再展开。

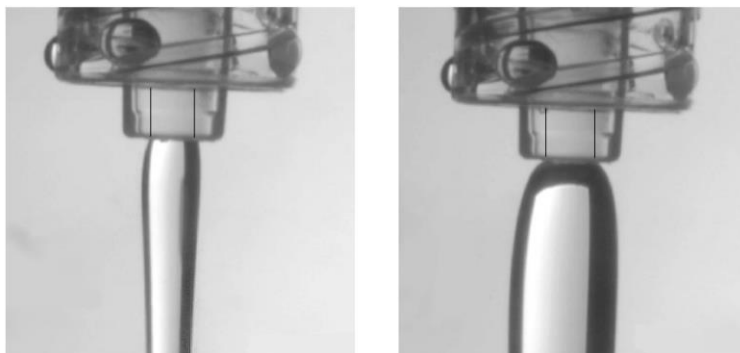
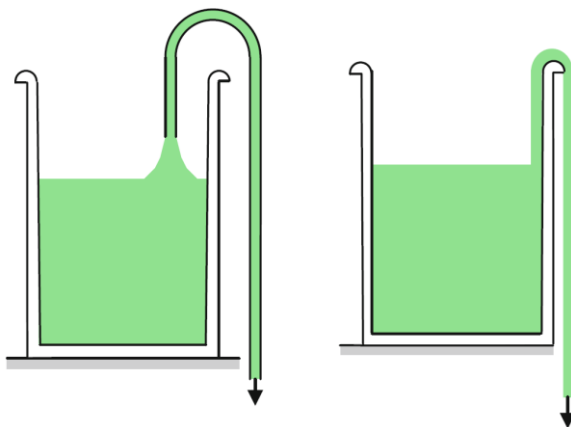


图 1.11 聚合物熔体的挤出胀大现象；(a) 低速挤出，(b) 高速挤出。

## (3) 无管虹吸现象

图 1.12 高粘弹性流体的无管虹吸现象<sup>[111]</sup>。

无论在牛顿流体还是非牛顿流体中都存在虹吸现象。不同的是，对于牛顿流体来说，当把管子提升到液面以上，虹吸现象就会终止。然而，对高粘弹性的非牛顿流体，比如聚物流体，即使在管子离开流体表面后其仍将继续流动，如图 1.12 所示。而且，如果容器是倾斜的，让液体开始流出边缘，即使不使用虹吸管也可以清空容器。液体的弹性将继续把液体提升到边缘，然后越过它，这就是非牛顿流体所特有的无管虹吸现象<sup>[112]</sup>。

## 1.4.3 非牛顿流体流动失稳研究进展

聚合物材料通常在熔融状态下进行加工，其在熔体状态就是一种典型的非牛顿流体（粘弹性）。由于在加工过程中的熔体的流动状态对最终制品的形态和性能有着关键的影响，因此，理解此类流体的流动不稳定的起源对于工业加工非常重要。不同于牛顿流体的惯性湍流，聚合物熔体的层流破坏是由弹性引起的<sup>[113, 115]</sup>。本节我们将介绍两种聚合物加工中常见的流体不稳定，并重点关注薄膜流延不稳定相关的研究进展。

## (1) 挤出熔体破裂

熔体挤出是一种较简单的加工操作但却至关重要，因为它在聚合物制造中普遍存在，并表现出复杂多样的加工不稳定性。例如，在一个典型的线性聚乙烯以特定的速率连续挤出时，随着挤出速率的增加，挤出物表面从光滑到粗糙再到周期性的扭曲，如图 1.13 所示<sup>[116]</sup>。这里的不稳定性主要涉及熔体断裂、壁面滑移等现象<sup>[117-120]</sup>。尽管在过去的 60 年中，已经提出了大量的理论来解释熔体断裂的起源，一些可能的解释包括：传统湍流效应，聚合物熔体的弹性效应导致入口处的分子结构的断裂以及熔体强度和壁面滑移理论<sup>[116]</sup>。但是，一个完整的理论解读至今仍然是缺乏的。这些现象不仅是学术上感兴趣的，而且也与工业加工相关，

因为它们会严重限制加工的生产速度。

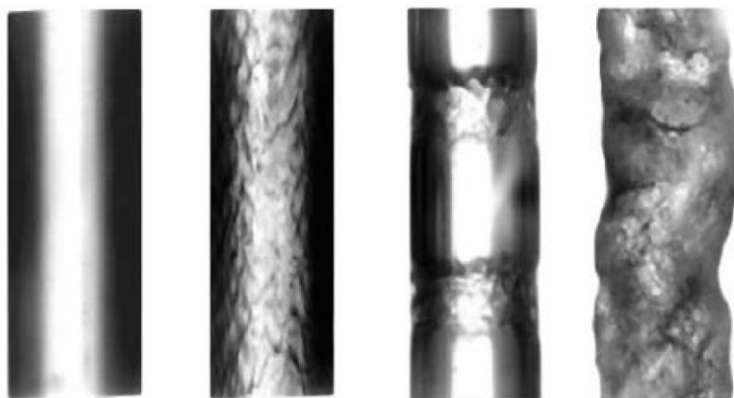


图 1.13 聚合物熔体挤出随着挤出速率增加从表面光滑到断裂的快照<sup>[116]</sup>。

#### (a) 拉伸共振失稳

除了挤出之外，聚合物的流延，纺丝，吹膜也是聚合物加工的重要方式。然而，在这些加工中都涉及一种流体动力学不稳定-拉伸共振失稳<sup>[121-126]</sup>。这种共振失稳表现为当加工速率达到一定程度时，制品的厚度，宽度或直径的周期性变化，甚至加工稳定性被完全破坏。在非线性动力学中，这种不稳定现象被称之为霍普夫分岔。这里，以薄膜流延（图 1.14 (a)）和吹膜加工（图 1.14 (b)）为例，典型的拉伸共振失稳表现为薄膜宽度，厚度或薄膜的直径随时间的周期性振荡。图 1.14 (c) 展示了本论文第七章中由数值模拟得到的薄膜流延的拉伸共振。图 1.14 (d) 引用了文献中报道的吹膜的共振失稳的图片<sup>[8]</sup>。事实上，这种失稳振荡非常有趣，因为其涉及一个有限的波长和振荡周期。

关于薄膜流延拉伸共振失稳的实验报道非常少。Yeow 等人<sup>[127]</sup>首次报道了薄膜流延稳定性的数值计算。基于线性流体动力学稳定性理论，他们给出了牛顿流体薄膜流延的中性稳定性曲线。在此基础上，Co 等人<sup>[128-130]</sup>通过引入更真实的粘弹性模型比如 Giesekus 模型，研究了材料的粘弹性对稳定性的影响。然而，这些基于小扰动的控制方程所进行的特征值分析仅提供稳定性的部分图像<sup>[131]</sup>。因此，Barq 等人<sup>[132]</sup>引入了施加在牵引辊上的卷取速度的阶跃扰动（这非常类似于实验），以研究牛顿流体等温薄膜流延的非线性稳定性。在他们的工作中，首次通过理论模型实现了薄膜流延的动态响应，即拉伸共振。从那时起，拉伸共振开始逐渐成为薄膜流延研究的焦点，因为它预示着流动不稳定的开始<sup>[9, 10, 129, 133-136]</sup>。继 Barq 等人<sup>[132]</sup>的工作之后，Agassant 等人<sup>[9, 10]</sup>研究了 Deborah 数 ( $De$ ) 和纵横比 ( $AR$ ) 对一维 (1D) 和二维 (2D) 等温薄膜流延过程的拉伸共振不稳定性的影响。他们发现，对于某些  $De$  存在不止一种临界拉伸比，而且增加  $AR$  可以提高加工过程的稳定性。此外，温度，惯性和重力对稳定性的影响也在以往的工作



中得到了系统的研究<sup>[137, 138]</sup>。需要指出的是，虽然相关的数值研究报道很多，但是考虑真实的加工环境（如非等温）以及聚合物熔体粘弹性的工作却仍然很少。本文的第七章就在真实的加工参数下，针对薄膜流延的稳定性进行了全面的数值分析。

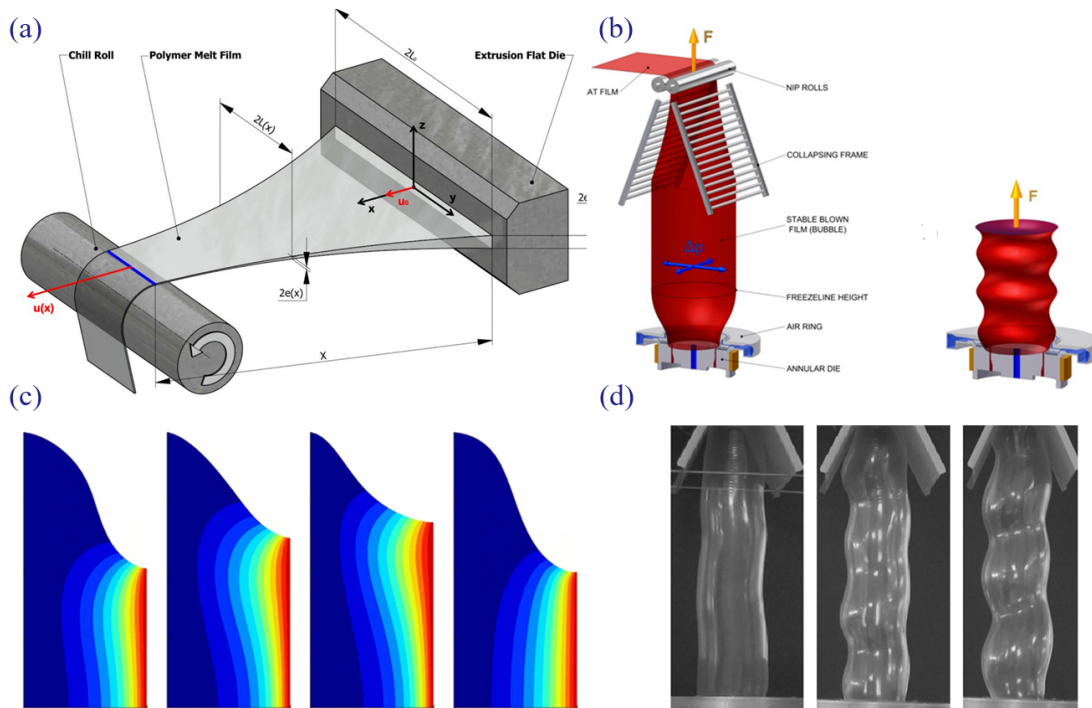


图 1.14 聚物流延以及吹膜加工中的拉伸共振失稳<sup>[8]</sup>。

## 1.5 本论文的研究内容和意义

该博士论文的工作致力于通过先进的数值模拟来揭示涉及连续体断裂，特别是动态断裂，以及非线性动力学失稳等极端问题的潜在物理根源。并开发一些新的算法和模型来处理断裂和流动不稳定领域长期存在的问题。

目前主要开展的研究工作总结如下：

(1) 针对断裂相场的精细网格需求，提出了一种新颖的自适应网格离散方案（称之为 *ha*-PFM）。基于相场轮廓的推进，一个新的近似裂纹尖端跟踪的策略被提出以识别细化区域。为了避免产生悬架节点，并保证裂纹尖端附近网格的高各向同性，开发了多层混合自适应的三角形和四边形单元离散策略。在非裂纹进展区，当相场小于一个阈值时，可以将细化网格重新转换为粗网格。

(2) 基于所开发 *ha*-PFM 研究了脆性材料的动态断裂。设计了高斯分布的断裂能以模拟真实材料的随机性。采用两组断裂能强弱分级的材料来观测裂纹的分岔起源。同时，统计了裂纹分岔的能量，并尝试给出一个分岔的能量准则，基

于此，动态断裂的极限速度也被进一步讨论。

(3) 在小变形的脆性断裂相场模型基础上，进一步在大变形框架下重构了断裂的相场模型，将吸收了无网格思想的光滑有限元算法 (ES-FEM) 首次用于断裂的相场建模。由于 ES-FEM 和 PFM 的高计算开销，我们开发了一个新的自适应算法以用于提高计算效率，一些大变形下的基准测试被成功的再现，并首次模拟了类橡胶材料中裂纹在弱界面处发生的偏转。

(4) 将脆性断裂的经典力学基相场模型直接推广到超弹性材料的非线性动态断裂被证实是不可行的。为此，基于非保守拉格朗日方程，我们推导出一种具有波速不变性的动态相场模型。针对大变形断裂中难以处理的网格畸变问题，提出了一种原始的自适应变形网格去除方案(ADMR)，并进行算法的数值实现。基于新的相场模型，对超高速动态断裂的路径振荡和裂尖劈裂失稳进行了一些初步探索。

(5) 采用著名的 PTT 微分型粘弹性模型分析非等温薄膜流延的稳定性。数值计算首次采用有限元法 (FEM) 结合粘弹性应力分裂算法 (DEVSS) 和流线迎风伽辽金法 (SUPG)来处理膜模型。加工参数以及材料的流变性质对稳定性的影响都被详细的调查。

(6) 自主开发高性能求解器：平台：Windows/Linux；编程语言：Matlab & C++ mex

*ha*-PFM V1.0-3.0: 基于自适应网格的断裂相场显式/隐式求解器；用于脆性/软材料准静态/动态断裂 (大变形)；具备多核并行，稀疏存储能力。

PolyLab V1.0-2.0: 定常和非定常瞬态粘弹性流体有限元求解器；多物理场耦合求解；扰动稳定性分析。

**当前研究工作的意义可以归纳为以下几点：**

(1) 所提出的 *ha*-PFM 可以极大的降低计算开销，相比采用均匀网格的相场方法可以提高计算效率 15~30 倍并降低内存需求约 70%。此外，裂纹尖端的高度各向同性网格对于动态裂纹的捕捉相比以往的自适应方法更加准确，且消除了悬挂节点避免了非物理的波反射。

(2) 基于相场断裂建模，提出了动态脆性断裂中裂纹分叉的一个普适的能量判据。基于这一能量判据，连续介质理论较好地解决了长期存在的极限裂纹扩展速度问题。本研究为揭示动态断裂的复杂物理机制提供了新的思路。

(3) 得益于在光滑有限元框架下重构了相场模型，大变形断裂涉及的网格扭曲以及精度问题被很好的解决。联合 PFM 和 ES-FEM 为大变形断裂的相场建模开辟了一个新的途径。一些在传统有限元方法中难以处理的大变形断裂得以顺利的实现。

(4) 基于所开发的新的相场模拟和 ADMR 算法, 实验中观测到超高速的裂纹振荡失稳以及裂纹尖端劈裂不稳定被成功再现。这项工作填补了当前力学学界的一项研究空白。为下一步理解断裂失稳的起源奠定基础。

(5) 首次将稳定化算法 DEVSS 和 SUPG 耦合到流延的膜模型中, 从而得以在更大的加工参数空间研究流延的稳定性, 一些新的现象被发现: 如随纵横比的变化, 发现存在两个临界的稳定拉伸比。而且, 不稳定的根本原因在流体的拉伸粘度, 提高拉伸粘度可以增大流动的稳定性的。

## 参考文献

- [1] Pommier S. Basics elements on linear elastic fracture mechanics and crack growth modeling[M]. Université Paris-Saclay; 2017.
- [2] Anderson TL. Fracture mechanics: fundamentals and applications[M]. CRC Press, 2017.
- [3] Bouchbinder E, Goldman T, Fineberg J. The dynamics of rapid fracture: instabilities, nonlinearities and length scales[J]. Reports on Progress in Physics, 2014, 77: 046501.
- [4] Fineberg J, Bouchbinder E. Recent developments in dynamic fracture: some perspectives[J]. International Journal of Fracture, 2015, 196: 33-57.
- [5] von H H. über discontinuirliche Flüssigkeits-Bewegungen[M]. Akademie der Wissenschaften zu Berlin, 1868.
- [6] Eggers J. Nonlinear dynamics and breakup of free-surface flows[J]. Reviews of Modern Physics, 1997, 69: 865.
- [7] Bhatara G, Shaqfeh ES, Khomami B. The influence of polymer concentration and chain architecture on free surface displacement flows of polymeric fluids[J]. Journal of Rheology, 2005, 49: 929-962.
- [8] Lee JS, Kwon I, Jung HW, Hyun JC. Helical instability in film blowing process: Analogy to buckling instability[J]. Physics of Fluids, 2017, 29: 121501.
- [9] Silagy D, Demay Y, Agassant JF. Study of the stability of the firm casting process[J]. Polymer Engineering and Science, 1996, 36: 2614-2625.
- [10] Silagy D, Demay Y, Agassant JF. Stationary and stability analysis of the film casting process[J]. Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 1998, 79: 563-583.
- [11] Lai WM, Rubin DH, Krepl E, Rubin D. Introduction to continuum mechanics: Butterworth-Heinemann, 2009.
- [12] Reddy JN. An introduction to continuum mechanics[M]. Cambridge University Press, 2013.
- [13] Broek D. Elementary engineering fracture mechanics[M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [14] Chhabra RP, Richardson JF. Non-Newtonian flow and applied rheology: engineering applications[M]. Butterworth-Heinemann, 2011.
- [15] Belytschko T, Liu WK, Moran B, Elkhodary K. Nonlinear finite elements for continua and structures[M]. John Wiley & Sons, 2013.
- [16] Holzapfel AG. Nonlinear solid mechanics II[M]. 2000.
- [17] Khraishi TA, Shen Y-L. Continuum mechanics: basic principles of vectors, tensors, and deformation[M]. Momentum Press, 2015.
- [18] Griffith AA. VI. The phenomena of rupture and flow in solids[J]. Philosophical transactions of the royal society of london Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character, 1921, 221: 163-198.
- [19] Inglis CE. Stresses in a plate due to the presence of cracks and sharp corners[J]. Trans Inst Naval Archit, 1913, 55: 219-241.
- [20] Irwin GR. Analysis of stresses and strains near the end of a crack transversing a plate[J]. J Appl

- Mech, 1957, 24: 361-364.
- [21] Mott NF. Brittle fracture in mild steel plates[J]. J Engineering, 1948, 165: 16-18.
- [22] Freund LB. Dynamic fracture mechanics[M]. Cambridge University Press, 1998.
- [23] Ravi-Chandar K. Dynamic fracture[M]. Elsevier, 2004.
- [24] Stroh AN. A theory of the fracture of metals[J]. Advances in Physics, 1957, 6: 418-465.
- [25] Rice JR. Mathematical analysis in the mechanics of fracture[J]. Fracture: an Advanced Treatise, 1968, 2: 191-311.
- [26] Eshelby J. Fracture mechanics[J]. Science Progress, 1971: 161-179.
- [27] Gol'Dstein R, Salganik R. Brittle fracture of solids with arbitrary cracks[J]. International Journal of Fracture, 1974, 10: 507-523.
- [28] Cotterell B, Rice J. Slightly curved or kinked cracks[J]. International Journal of Fracture, 1980, 16: 155-169.
- [29] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Local crack branching as a mechanism for instability in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 1995, 74: 5096.
- [30] Sharon E, Fineberg J. Confirming the continuum theory of dynamic brittle fracture for fast cracks[J]. Nature, 1999, 397: 333.
- [31] Bouchbinder E, Fineberg J, Marder M. Dynamics of simple cracks[J]. Annu Rev Condens Matter Phys, 2010, 1: 371-395.
- [32] Fineberg J, Gross S, Sharon E. Micro-branching as an instability in dynamic fracture. IUTAM Symposium on Nonlinear Analysis of Fracture[M]. Springer; 1997: 177-189.
- [33] Livne A, Ben-David O, Fineberg J. Oscillations in rapid fracture[J]. Physical Review Letters, 2007, 98: 124301.
- [34] Bouchbinder E. Dynamic crack tip equation of motion: high-speed oscillatory instability[J]. Physical Review Letters, 2009, 103: 164301.
- [35] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Energy dissipation in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 1996, 76: 2117.
- [36] Bleyer J, Molinari J-F. Microbranching instability in phase-field modelling of dynamic brittle fracture[J]. Applied Physics Letters, 2017, 110: 151903.
- [37] Ravi-Chandar K, Knauss W. An experimental investigation into dynamic fracture: III. On steady-state crack propagation and crack branching[J]. International Journal of Fracture, 1984, 26: 141-154.
- [38] Ravi-Chandar K, Knauss W. An experimental investigation into dynamic fracture: IV. On the interaction of stress waves with propagating cracks[J]. International Journal of Fracture, 1984, 26: 189-200.
- [39] Fineberg J, Gross SP, Marder M, Swinney HL. Instability in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 1991, 67: 457.
- [40] Sharon E, Fineberg J. Microbranching instability and the dynamic fracture of brittle materials[J]. Physical Review B, 1996, 54: 7128.

- [41] Livne A, Cohen G, Fineberg J. Universality and hysteretic dynamics in rapid fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94: 224301.
- [42] Cross MC, Hohenberg PC. Pattern formation outside of equilibrium[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1993, 65: 851.
- [43] Ravi-Chandar K, Yang B. On the role of microcracks in the dynamic fracture of brittle materials[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 1997, 45: 535-563.
- [44] Cramer T, Wanner A, Gumbsch P. Energy dissipation and path instabilities in dynamic fracture of silicon single crystals[J]. *Physical Review Letters*, 2000, 85: 788.
- [45] Karma A, Kessler DA, Levine H. Phase-Field Model of Mode III Dynamic Fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 87: 045501.
- [46] Karma A, Lobkovsky AE. Unsteady Crack Motion and Branching in a Phase-Field Model of Brittle Fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 92: 245510.
- [47] Hakim V, Karma A. Laws of crack motion and phase-field models of fracture[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2009, 57: 342-368.
- [48] Henry H, Adda-Bedia M. Fractographic aspects of crack branching instability using a phase-field model[J]. *Physical Review E*, 2013, 88: 060401.
- [49] Svetlizky I, Fineberg J. Classical shear cracks drive the onset of dry frictional motion[J]. *Nature*, 2014, 509: 205-208.
- [50] Chen C-H, Bouchbinder E, Karma A. Instability in dynamic fracture and the failure of the classical theory of cracks[J]. *Nature Physics*, 2017, 13: 1186-1190.
- [51] Lubomirsky Y, Chen C-H, Karma A, Bouchbinder E. Universality and stability phase diagram of two-dimensional brittle fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121: 134301.
- [52] Barenblatt GI. The formation of equilibrium cracks during brittle fracture. General ideas and hypotheses. Axially-symmetric cracks[J]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1959, 23: 622-636.
- [53] Barenblatt GI. The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture[M]. *Advances in applied mechanics: Elsevier*; 1962: 55-129.
- [54] Dugdale DS. Yielding of steel sheets containing slits[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1960, 8: 100-104.
- [55] Holland D, Marder M. Cracks and atoms[J]. *Advanced Materials*, 1999, 11: 793-806.
- [56] Scholz CH. Earthquakes and faulting[M]. Cambridge University Press Cambridge; 2002.
- [57] Bouchbinder E, Livne A, Fineberg J. Weakly nonlinear fracture mechanics: experiments and theory[J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 162: 3-20.
- [58] Rice JR, Tracey DM. Computational Fracture Mechanics. In: Fenves SJ, Perrone N, Robinson AR, Schnobrich WC, editors. *Numerical and Computer Methods in Structural Mechanics: Academic Press*; 1973: 585-623.
- [59] Wu J-Y. Robust numerical implementation of non-standard phase-field damage models for failure in solids[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 340: 767-797.

- [60] Belytschko T, Black T. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1999, 45: 601-620.
- [61] Bordas SPA, Natarajan S, Kerfriden P, Augarde CE, Mahapatra DR, Rabczuk T, Pont SD. On the performance of strain smoothing for quadratic and enriched finite element approximations (XFEM/GFEM/PUFEM)[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2011, 86: 637-666.
- [62] Moës N, Dolbow J, Belytschko T. A finite element method for crack growth without remeshing[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1999, 46: 131-150.
- [63] Wang Z, Yu T, Bui TQ, Tanaka S, Zhang C, Hirose S, Curiel-Sosa JL. 3-D local mesh refinement XFEM with variable-node hexahedron elements for extraction of stress intensity factors of straight and curved planar cracks[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, 313: 375-405.
- [64] Benson DJ, Bazilevs Y, de Luycker E, Hsu MC, Scott M, Hughes TJR, Belytschko T. A generalized finite element formulation for arbitrary basis functions: From isogeometric analysis to XFEM[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010, 83: 765-785.
- [65] De Luycker E, Benson DJ, Belytschko T, Bazilevs Y, Hsu MC. X - FEM in isogeometric analysis for linear fracture mechanics[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2011, 87: 541-565.
- [66] Ghorashi SS, Valizadeh N, Mohammadi S. Extended isogeometric analysis for simulation of stationary and propagating cracks[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2012, 89: 1069-1101.
- [67] Hughes TJR, Cottrell JA, Bazilevs Y. Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2005, 194: 4135-4195.
- [68] Frémond M, Nedjar B. Damage, gradient of damage and principle of virtual power[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1996, 33: 1083-1103.
- [69] Francfort GA, Marigo JJ. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46: 1319-1342.
- [70] Bourdin B, Francfort GA, Marigo JJ. Numerical experiments in revisited brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48: 797-826.
- [71] Bourdin B, Francfort GA, Marigo JJ. The Variational Approach to Fracture[J]. *Journal of Elasticity*, 2008, 91: 5-148.
- [72] Li T, Marigo J-J, Guilbaud D, Potapov S. Gradient damage modeling of brittle fracture in an explicit dynamics context[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2016, 108: 1381-1405.
- [73] Aranson IS, Kalatsky VA, Vinokur VM. Continuum Field Description of Crack Propagation[J]. *Physical Review Letters*, 2000, 85: 118-121.
- [74] Henry H, Levine H. Dynamic Instabilities of Fracture under Biaxial Strain Using a Phase Field

- Model[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 93: 105504.
- [75] Bourdin B, Francfort GA, Marigo J-J. Numerical experiments in revisited brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2000, 48: 797-826.
- [76] Bourdin B, Francfort GA, Marigo J-J. The variational approach to fracture[J]. *Journal of Elasticity*, 2008, 91: 5-148.
- [77] Ambati M, Gerasimov T, De Lorenzis L. Phase-field modeling of ductile fracture[J]. *Computational Mechanics*, 2015, 55: 1017-1040.
- [78] Miehe C, Hofacker M, Welschinger F. A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2010, 199: 2765-2778.
- [79] Miehe C, Welschinger F, Hofacker M. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010, 83: 1273-1311.
- [80] Verhoosel CV, Borst R. A phase-field model for cohesive fracture[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2013, 96: 43-62.
- [81] Weinberg K, Dally T, Schuß S, Werner M, Bilgen C. Modeling and numerical simulation of crack growth and damage with a phase field approach[J]. *GAMM-Mitteilungen*, 2016, 39: 55-77.
- [82] Amor H, Marigo J-J, Maurini C. Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2009, 57: 1209-1229.
- [83] Ambati M, Gerasimov T, De Lorenzis L. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation[J]. *Computational Mechanics*, 2015, 55: 383-405.
- [84] Hesch C, Weinberg K. Thermodynamically consistent algorithms for a finite-deformation phase-field approach to fracture[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2014, 99: 906-924.
- [85] Miehe C, Schänzel L-M. Phase field modeling of fracture in rubbery polymers. Part I: Finite elasticity coupled with brittle failure[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 65: 93-113.
- [86] Hesch C, Weinberg K. Thermodynamically consistent algorithms for a finite - deformation phase - field approach to fracture[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2014, 99: 906-924.
- [87] Miehe C, Schänzel L-M. Phase field modeling of fracture in rubbery polymers. Part I: Finite elasticity coupled with brittle failure[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2014, 65: 93-113.
- [88] Wu J, McAuliffe C, Waisman H, Deodatis G. Stochastic analysis of polymer composites rupture at large deformations modeled by a phase field method[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering* 2016, 312: 596-634.
- [89] Tian F, Tang X, Xu T, Li L. An adaptive edge-based smoothed finite element method (ES-FEM) for



- phase-field modeling of fractures at large deformations[J]. arXiv preprint arXiv:10858, 2019.
- [90] Miehe C, Hofacker M, Schänzel LM, Aldakheel F. Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part II. Coupled brittle-to-ductile failure criteria and crack propagation in thermo-elastic-plastic solids[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 294: 486-522.
- [91] Wick T. Coupling fluid-structure interaction with phase-field fracture[J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 327: 67-96.
- [92] Wu J-Y, Nguyen VP, Nguyen CT, Sutula D, Bordas S, Sinaie S. Phase field modeling of fracture[J]. *Advances in Applied Mechancis: Multi-scale Theory Computational Mechanics*, 2018, 52.
- [93] Cox BN, Gao H, Gross D, Rittel D. Modern topics and challenges in dynamic fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53: 565-596.
- [94] Borden MJ, Verhoosel CV, Scott MA, Hughes TJR, Landis CM. A phase-field description of dynamic brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, 217-220: 77-95.
- [95] Hofacker M, Miehe C. Continuum phase field modeling of dynamic fracture: variational principles and staggered FE implementation[J]. *International Journal of Fracture*, 2012, 178: 113-129.
- [96] Bleyer J, Roux-Langlois C, Molinari J-F. Dynamic crack propagation with a variational phase-field model: limiting speed, crack branching and velocity-toughening mechanisms[J]. *International Journal of Fracture*, 2017, 204: 79-100.
- [97] Chen C-H, Bouchbinder E, Karma A. Instability in dynamic fracture and the failure of the classical theory of cracks[J]. *Nature Physics*, 2017, 13: 1186.
- [98] Lee S, Wheeler MF, Wick T. Pressure and fluid-driven fracture propagation in porous media using an adaptive finite element phase field model[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 305: 111-132.
- [99] Heister T, Wheeler MF, Wick T. A primal-dual active set method and predictor-corrector mesh adaptivity for computing fracture propagation using a phase-field approach[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 290: 466-495.
- [100] Zhang F, Huang W, Li X, Zhang S. Moving mesh finite element simulation for phase-field modeling of brittle fracture and convergence of Newton's iteration[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 356: 127-149.
- [101] Patil RU, Mishra BK, Singh IV. An adaptive multiscale phase field method for brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 329: 254-288.
- [102] Gerasimov T, De Lorenzis L. A line search assisted monolithic approach for phase-field computing of brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 312: 276-303.
- [103] Wheeler MF, Wick T, Wollner W. An augmented-Lagrangian method for the phase-field approach for pressurized fractures[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2014, 271: 69-85.
- [104] Wick T. Modified Newton methods for solving fully monolithic phase-field quasi-static brittle

- fracture propagation[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, 325: 577-611.
- [105] Zhang HW, Wu JK, Lv J. A new multiscale computational method for elasto-plastic analysis of heterogeneous materials[J]. *Computational Mechanics*, 2012, 49: 149-169.
- [106] Badnava H, Msekh MA, Etemadi E, Rabczuk T. An h-adaptive thermo-mechanical phase field model for fracture[J]. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2018, 138: 31-47.
- [107] Huang W, Ren Y, Russell RD. Moving Mesh Methods Based on Moving Mesh Partial Differential Equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, 113: 279-290.
- [108] Shen J, Yang X. An efficient moving mesh spectral method for the phase-field model of two-phase flows[J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228: 2978-2992.
- [109] Tian F, Tang X, Xu T, Yang J, Li L. A hybrid adaptive finite element phase - field method for quasi - static and dynamic brittle fracture[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2019, 120: 1108-1125.
- [110] Anderson JD, Wendt J. *Computational fluid dynamics*[M]. Springer, 1995.
- [111] Böhme G. *Non-Newtonian fluid mechanics*: Elsevier, 2012.
- [112] Bird RB, Armstrong RC, Hassager O. *Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics*[J]. 1987.
- [113] Lenk RS. *Polymer rheology*[M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [114] Tanner RI. *Engineering rheology*[M]. OUP Oxford, 2000.
- [115] Larson RG. Instabilities in viscoelastic flows[J]. *Rheologica Acta*, 1992, 31: 213-263.
- [116] Hatzikiriakos SG, Migler KB. *Polymer processing instabilities: control and understanding*[M]. CRC Press, 2004.
- [117] Han C, Lamonte R. A study of polymer melt flow instabilities in extrusion[J]. *Polymer Engineering Science*, 1971, 11: 385-394.
- [118] Shore JD, Ronis D, Piché L, Grant M. Model for melt fracture instabilities in the capillary flow of polymer melts[J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77: 655.
- [119] Bertola V, Meulenbroek B, Wagner C, Storm C, Morozov A, van Saarloos W, Bonn D. Experimental evidence for an intrinsic route to polymer melt fracture phenomena: a nonlinear instability of viscoelastic Poiseuille flow[J]. *Physical Review Letters*, 2003, 90: 114502.
- [120] Koopmans R, Den Doelder J, Molenaar J. *Polymer melt fracture*[M]. CRC Press, 2010.
- [121] Jung HW, Lee JS, Hyun JC. Sensitivity analysis of melt spinning process by frequency response[J]. *Korea-Australia Rheology Journal*, 2002, 14: 57-62.
- [122] Kim BM, Hyun JC, Oh JS, Lee SJ. Kinematic waves in the isothermal melt spinning of Newtonian fluids[J]. *Aiche Journal*, 1996, 42: 3164-3169.
- [123] Lee JS, Jung HW, Kim SH, Hyun JC. Effect of fluid viscoelasticity on the draw resonance dynamics of melt spinning[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2001, 99: 159-166.
- [124] van der Walt C, Hulslen MA, Bogaerds ACB, Meijer HEH, Bulters MJH. Stability of fiber spinning under filament pull-out conditions[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2012, 175: 25-

37.

- [125] Fleissner M. Elongational Flow of HDPE Samples and Bubble Instability in Film Blowing[J]. *International Polymer Processing*, 1988, 2: 229-233.
- [126] Laffargue J, Parent L, Lafleur PG, Carreau PJ, Demay Y, Agassant JF. Investigation of Bubble Instabilities in Film Blowing Process[J]. *International Polymer Processing*, 2002, 17: 347-353.
- [127] Yeow YL. On the stability of extending films: a model for the film casting process[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1974, 66: 613-622.
- [128] Anturkar NR, Co A. Draw resonance in film casting of viscoelastic fluids: A linear stability analysis[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1988, 28: 287-307.
- [129] Iyengar VR, Co A. Film casting of a modified Giesekus fluid: Stability analysis[J]. *Chemical Engineering Science*, 1996, 51: 1417-1430.
- [130] PisLopez ME, Co A. Multilayer film casting of modified Giesekus fluids 2. Linear stability analysis[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1996, 66: 95-114.
- [131] Fisher RJ, Denn MM. Finite-amplitude stability and draw resonance in isothermal melt spinning[J]. *Chemical Engineering Science*, 1975, 30: 1129-1134.
- [132] Barq P, Haudin JM, Agassant JF, Roth H, Bourgin P. Instability Phenomena in Film Casting Process[J]. *International Polymer Processing*, 1990, 5: 264-271.
- [133] Lee JS, Jung HW, Song HS, Lee KY, Hyun JC. Kinematic waves and draw resonance in film casting process[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2001, 101: 43-54.
- [134] Cao F, Khayat RE, Puskas JE. Effect of inertia and gravity on the draw resonance in high-speed film casting of Newtonian fluids[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2005, 42: 5734-5757.
- [135] Shin DM, Lee JS, Kim JM, Jung HW, Hyun JC. Transient and steady-state solutions of 2D viscoelastic nonisothermal simulation model of film casting process via finite element method[J]. *Journal of Rheology*, 2007, 51: 393-407.
- [136] Ahmed ZU, Khayat RE. Three Dimensional Film Stability and Draw Resonance[J]. *Journal of Fluids Engineering-Transactions of the Asme*, 2012, 134.
- [137] Cao F, Khayat RE, Puskas JE. Effect of inertia and gravity on the draw resonance in high-speed film casting of Newtonian fluids[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2005, 42: 5734-5757.
- [138] Zavinska O, Claracq J, van Eijndhoven S. Non-isothermal film casting: Determination of draw resonance[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2008, 151: 21-29.



## 第 2 章 脆性断裂的混合自适应相场方法

### 2.1 引言

PFM 在模拟断裂过程方面很有前景，但鉴于其对网格的要求极其精细，且势能函数具有非凸性，其工程应用是一项艰巨的任务。关于这两个问题已有大量的研究成果报道<sup>[1-8]</sup>。对于后者，Miehe 等人<sup>[9]</sup>提出了一种鲁棒的 staggered 算法，目前广泛采用该算法来解耦强非线性控制方程。相反地，Gerasimov 等人<sup>[5]</sup>提出了一种线搜索辅助法来加速 monolithic 算法的收敛。最近，一种改进的牛顿迭代方法被发展来改善完全 monolithic 算法，它巧妙地将 staggered 和 monolithic 策略相结合<sup>[7]</sup>。另一方面，为了在不显著增加计算成本的情况下满足极其精细的网格需求，自适应网格方法将是一个不错的选择，例如  $h$  自适应网格和移动网格 FEM<sup>[10-12]</sup>。最近，Singh 等人<sup>[4]</sup>提出了一种自适应多尺度相场方法 (AMPFM)，该方法是在多尺度有限元方法 (MsFEM) 中建立的<sup>[8, 13]</sup>。在他们的方案中，可以将邻近裂纹区域过多细化的网格重新转换为粗网格，从而显著的减少计算资源的消耗。

受 Singh 等人<sup>[4]</sup>工作的启发，我们在本章给出了一种新的混合自适应有限元相场方法 ( $ha$ -PFM) 来处理准静态和动态脆性断裂问题。不同于以往工作中提出的自适应相场方法， $ha$ -PFM 包含两项关键创新。首先，我们提出了一种新颖的近似裂纹尖端跟踪策略来识别细化域，从而显著降低了自适应算法的计算成本。具体来说，自适应网格细化和粗化所花费的时间不到总计算时间的 1%。其次，我们进一步发展了自适应多级混合单元 (T3 和 Q4 单元) 来离散化求解域。其中 Q4 单元从具有最高和最低细化级别的 T3 单元转换而来，而 T3 单元仅充当连接细单元和粗单元的过渡单元。基于该离散化方案，不仅巧妙地消除了多尺度和  $h$  自适应网格中存在的悬挂节点<sup>[1, 14]</sup>，而且确保了裂纹尖端附近网格的各向同性。因此，算法的复杂度进一步降低，计算速度得到了极大地提高 (15~30 倍) 而又不损失精度。此外，通过重新测试几个具有代表性的基准算例并将结果与标准 PFM (使用均匀网格) 以及文献结果进行比较，从而证明了  $ha$ -PFM 的出色性能。

### 2.2 断裂相场模型

#### 2.2.1 裂纹拓扑的相场描述

首先，我们考虑一个包含内部不连续边界的各向同性的线弹性体  $\Omega \subset \mathbb{R}^n, n=2,3$  作为参考构型，如图 2.1 (a) 所示。定义域  $\Omega$  的 Dirichlet 以及 Neumann 边界分别表示为  $\mathcal{B}_D$  和  $\mathcal{B}_N$ 。根据起源于经典 Griffith 理论并由 Francfort

and Marigo 等人发展的断裂变分原理<sup>[15]</sup>，含裂纹体的势能泛函可以定义为：

$$\Pi(\mathbf{u}, \mathcal{C}) = \int_{\Omega} \psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) d\Omega + \int_{\mathcal{C}} G_c d\mathcal{C} \quad (2.1)$$

其中  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$  表示位移场， $G_c$  表示材料的断裂能。在小变形假设下，应变张量  $\boldsymbol{\varepsilon}$  的组分可以表示为：

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j = 1, \dots, n \quad (2.2)$$

对于各向同性线性弹性介质，应变能密度为：

$$\psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} (\text{tr} \boldsymbol{\varepsilon})^2 + \mu \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.3)$$

其中， $\lambda$  和  $\mu$  为拉梅常数。

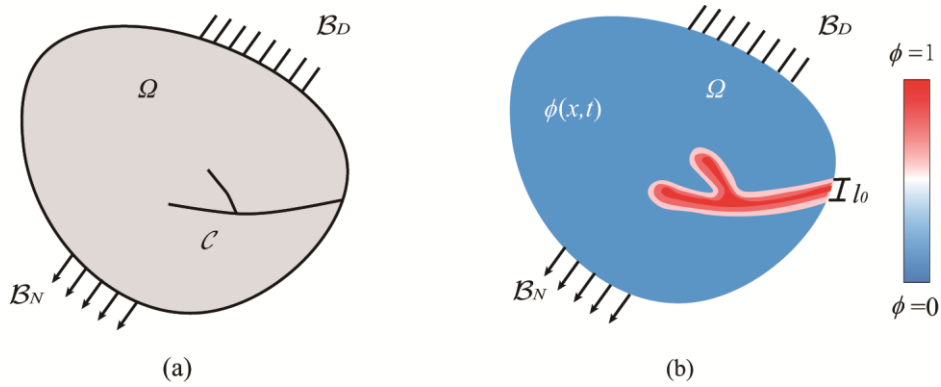


图 2.1 (a) 包含不连续边界  $\mathcal{C}$  的连续体示意图; (b) 不连续边界的相场近似（扩散裂纹）。

现在，我们考虑采用一个裂纹表面密度函数  $\gamma(\phi, \dot{\phi})$  来正则化裂纹表面积分：

$$\int_{\mathcal{C}} G_c d\mathcal{C} \approx G_c \int_{\Omega} \gamma(\phi, \dot{\phi}) d\Omega \quad (2.4)$$

其中， $\gamma(\phi, \dot{\phi})$  具有几种不同的格式，一类使用比较广泛的格式如下<sup>[16]</sup>：

$$\int_{\Omega} G_c \gamma(\phi, \dot{\phi}) d\Omega = \frac{G_c}{4c_w} \int_{\Omega} \left( \frac{w(\phi)}{l_0} + l_0 \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right) d\Omega \quad (2.5)$$

这里， $c_w = \int_0^1 \sqrt{w(\phi)} d\phi$ ， $l_0$  是一个正则化参数，控制扩散裂纹的宽度。关于裂纹表面能的近似，一般采用以下两种格式：

$$\begin{aligned} \text{AT1: } \gamma(\phi, \nabla \phi) &= \frac{3}{8} \left[ \frac{1}{l_0} \phi + l_0 (\nabla \phi \cdot \nabla \phi) \right] \\ \text{AT2: } \gamma(\phi, \nabla \phi) &= \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{l_0} \phi^2 + l_0 (\nabla \phi \cdot \nabla \phi) \right] \end{aligned} \quad (2.6)$$

本章我们采用的是 AT2 模型<sup>[17]</sup>。两种格式差异主要表现在相场损伤带上，AT1 模型预测了一个有限宽度的损伤带，其包含纯弹性阶段，而 AT2 模型则是无限支

撑的损伤带。为清晰起见，图 2.2 给出了两种模型的一维损伤轮廓。

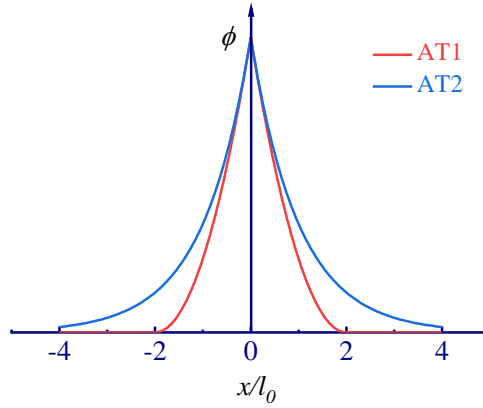


图 2.2 AT1 和 AT2 模型的一维损伤轮廓。

为了避免因压缩导致的非物理的裂纹成核和扩展，需要将弹性能  $\psi_e(\boldsymbol{\varepsilon})$  分解为正负两部分<sup>[9, 17]</sup>。通过在方程 2.3 中引入退化函数

$$g(\phi) = [(1-\phi)^2 + k] \quad (2.7)$$

其中， $0 \leq k \ll 1$  被添加以获得更好的数值稳定性，我们得到

$$\psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}) = [(1-\phi)^2 + k] \psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}) + \psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (2.8)$$

其中  $\psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon})$  和  $\psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon})$  的选择有几种不同的格式。这里给出两种比较有代表性的模型。

首先给出的是 Amor 等人<sup>[18]</sup>的模型，他们将弹性应变能分解为体积和偏差贡献，即：

$$\begin{cases} \psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} K_n \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+^2 + \mu (\boldsymbol{\varepsilon}^{dev} : \boldsymbol{\varepsilon}^{dev}) \\ \psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} K_n \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_-^2 \end{cases} \quad (2.9)$$

其中， $K_n = \lambda + \frac{2\mu}{n}$  为 n-维的体积模量，麦考利括号运算符定义为  $\langle x \rangle_{\pm} = \frac{1}{2}(x \pm |x|)$ ，偏应变张量  $\boldsymbol{\varepsilon}^{dev} = \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I}$ 。

除了上面的偏应变分解，Miehe 等人<sup>[19]</sup>也给出一个应用更广泛的应变谱分解格式，其定义为：

$$\psi_e^{\pm}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_{\pm}^2 + \mu \text{tr}[(\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm})^2] \quad (2.10)$$

其中，应变的谱分解为：

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\pm} = \sum_{a=1}^n \langle \boldsymbol{\varepsilon}_a \rangle_{\pm} \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{n}_a \quad (2.11)$$

这里,  $\boldsymbol{\varepsilon}_a$  和  $\mathbf{n}_a$  分别表示应变张量的特征值和特征向量。

一些研究表明, 式 2.10 的分解格式适合于比较脆的材料, 但是其损失了断裂问题的变分属性。关于这两种分解格式的对比可以参考 Li 等人<sup>[20]</sup>的工作。

基于拉压分解格式以及裂纹的正则化, 总的势能泛函可以写为:

$$\Pi(\mathbf{u}, \mathcal{L}) = \int_{\Omega} \left\{ [(1-\phi)^2 + k] \psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}) + \psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \right\} dV + \int_{\Omega} G_c \left[ \frac{\phi^2}{2l_0} + \frac{l_0}{2} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right] dV \quad (2.12)$$

考虑对方程 2.12 的势能泛函进行最小化, 即:

$$(\mathbf{u}(t), \mathcal{L}(t)) = \text{Arg} \{ \min \Pi(\mathbf{u}, \mathcal{L}) \} \quad (2.13)$$

通过式 2.12 和 2.13 可以很容易导出准静态断裂的控制方程。由于准静态是动态断裂的简化情况, 这里, 我们直接考虑一个动态断裂问题。

在动态断裂的情况下, 动能项表示为

$$T(\dot{\mathbf{u}}) = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho \dot{u}_i \cdot \dot{u}_i dV \quad (2.14)$$

其中  $\rho$  是材料的密度,  $\dot{\mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$  表示速度场。结合方程 2.13 和 2.14, 拉格朗日算子可以直接写出为:

$$\begin{aligned} L = T - \Pi = & \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho \dot{u}_i \cdot \dot{u}_i dV - \int_{\Omega} \left\{ [(1-\phi)^2 + k] \psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}) + \psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \right\} dV \\ & + \int_{\Omega} G_c \left[ \frac{\phi^2}{2l_0} + \frac{l_0}{2} \nabla \phi \cdot \nabla \phi \right] dV \end{aligned} \quad (2.15)$$

## 2.2.2 脆性断裂的控制方程

根据哈密顿原理对拉格朗日算子  $L$  执行变分, 导出欧拉-拉格朗日方程为:

$$\begin{cases} \text{Div}[\boldsymbol{\sigma}] = \rho \ddot{\mathbf{u}} \\ \left( \frac{G_c}{l_0} + 2\psi_e^+ \right) \phi - G_c l_0 \nabla^2 \phi = 2\psi_e^+ \end{cases} \quad (2.16)$$

其中的柯西应力张量表示为:

$$\boldsymbol{\sigma} = [(1-\phi)^2 + k] \frac{\partial \psi_e^+}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} + \frac{\partial \psi_e^-}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \quad (2.17)$$

这里, 我们采用 Miehe 等人的谱分解格式<sup>[19]</sup>, 从而, 式 2.17 可以写为:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} = & [(1-\phi)^2 + k] (\lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_+) \\ & + (\lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_- \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_-) \end{aligned} \quad (2.18)$$

注意到, 方程 2.16 是强形式的控制方程, 满足如下边界条件



$$\begin{cases} \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} & \text{on } \mathcal{B}_D \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{h}} & \text{on } \mathcal{B}_N \\ \nabla d \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.19)$$

其中,  $\bar{\mathbf{u}}$  和  $\bar{\mathbf{h}}$  分别表示边界  $\mathcal{B}_D$  的位移和边界  $\mathcal{B}_N$  的牵引力矢量。 $\mathbf{n}$  边界  $\partial\Omega$  的外法向矢量。

为满足裂纹生长的不可逆性, 一个最大历史应变场

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) = \max_{s \in [0, t]} \psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, s)) \quad (2.20)$$

被引入以替代方程 2.10 中的  $\psi_e^+$ , 从而阻止随着  $\psi_e^+$  的下降而出现的非物理的裂纹愈合<sup>[9]</sup>。此外, 该方法对方程 2.16 进行了解耦, 得到了一个在当前工作中所采用的更高效, 更健壮的 **staggered** 算法。注意这种不可逆的设置方式只适用于  $w(\phi) = \phi^2$  这样的相场模型<sup>[21]</sup>。对于其他类型的相场模型, 有一些替代的格式来实施强制的不可逆约束, 比如设置  $\dot{\phi} \geq 0$ , 在后面的章节我们会介绍。

### 2.2.3 数值实施

前一小节中的控制方程是通过有限元方法 (FEM) 进行数值求解的, 这需要进行时间空间离散化。从 Galerkin 格式的空间离散化开始, 方程 2.16 的弱形式可以给出如下

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (\rho \ddot{\mathbf{u}} \cdot \delta \mathbf{u} + \boldsymbol{\sigma} : \delta \nabla \mathbf{u}) dV - \int_{\mathcal{B}} \bar{\mathbf{h}} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \\ \int_{\Omega} -2(1-\phi) \delta \phi \mathcal{H} dV + \int_{\Omega} G_c \left( l_0 \nabla \phi \cdot \nabla \delta \phi + \frac{1}{l_0} \phi \delta \phi \right) dV = 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

其中  $\delta \mathbf{u}$  和  $\delta \phi$  是试函数。基本场变量  $\mathbf{u}$ ,  $\phi$  以及其梯度被离散为

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{N}_i^u \mathbf{u}_i, \quad \phi = \sum_{i=1}^m N_i \phi_i, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{B}_i^u \mathbf{u}_i, \quad \nabla \phi = \sum_{i=1}^m \mathbf{B}_i^{\phi} \phi_i \quad (2.22)$$

其中,  $N_i$  为形函数,  $\mathbf{B}$  以及为形函数的梯度, 定义为

$$\mathbf{B}_i^u = \begin{bmatrix} N_{i,x} & 0 \\ 0 & N_{i,y} \\ N_{i,y} & N_{i,x} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_i^{d=} = \begin{bmatrix} N_{i,x} \\ N_{i,y} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

利用公式 2.21-2.23, 可以将单元水平上节点  $i$  处的全局残余矢量表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_i^u &= \int_{\Gamma} N_i \bar{\mathbf{h}} dA - \int_{\Omega} \mathbf{B}_i^u \boldsymbol{\sigma} dV - \int_{\Omega} \rho N_i \ddot{\mathbf{u}} dV \\ \mathbf{R}_i^d &= \int_{\Omega} G_c \left( l_0 [\mathbf{B}_i^d]^T \nabla d + \frac{1}{l_0} N_i d \right) dV - \int_{\Omega} 2(1-d) N_i \mathcal{H} dV \end{aligned} \quad (2.24)$$

在 monolithic 求解策略中, 基本未知量  $\mathbf{u}$ ,  $\phi$  可以被同时求解, 通过牛顿-拉普森迭代求解如下格式的非线性方程组

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{R}^{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{R}^{\mathbf{u}}}{\partial \phi} \cdot \Delta \phi = -\mathbf{R}^{\mathbf{u}} \\ \frac{\partial \mathbf{R}^{\phi}}{\partial \phi} \cdot \Delta \phi + \frac{\partial \mathbf{R}^{\phi}}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} = -\mathbf{R}^{\phi} \end{cases} \quad (2.25)$$

通过简单的求导, 我们可以导出相应的刚度矩阵, 首先给出准静态的刚度矩阵:

$$\begin{cases} \mathbf{K}_{ij}^{\mathbf{u}\mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{u}} = \int_{\Omega} [\mathbf{B}_i^{\mathbf{u}}]^T \mathbb{C} \mathbf{B}_j^{\mathbf{u}} d\Omega \\ \mathbf{K}_{ij}^{\mathbf{u}\phi} = \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\mathbf{u}}}{\partial \phi} = \int_{\Omega} -2(1-\phi) [\mathbf{B}_i^{\mathbf{u}}]^T \left( \lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_+ \right) N_j d\Omega \\ \mathbf{K}_{ij}^{\phi\mathbf{u}} = \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\phi}}{\partial \mathbf{u}} = \int_{\Omega} -2(1-\phi) N_i \left[ \left( \lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle_+ \mathbf{1} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}_+ \right) \right]^T \mathbf{B}_j^{\mathbf{u}} d\Omega \\ \mathbf{K}_{ij}^{\phi\phi} = \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\phi}}{\partial \phi} = \int_{\Omega} [\mathbf{B}_i^d]^T G_c l_0 [\mathbf{B}_j^d] + N_i \left( 2\mathcal{H} + \frac{G_c}{l_0} \right) N_j d\Omega \end{cases} \quad (2.26)$$

注意到, 在稳健的 staggered 算法中,  $\mathbf{K}^{\mathbf{u}\phi}$  和  $\mathbf{K}^{\phi\mathbf{u}}$  可以被忽略。在小的加载步长条件下, 这一个方案被证实是稳定且高效的<sup>[19]</sup>。在式 2.26 中,  $\mathbb{C}$  是一个四阶弹性张量, 其可以写为:

$$\mathbb{C} = [(1-d)^2 + k] \mathbb{C}^+ + \mathbb{C}^- \quad (2.27)$$

式 2.27 的具体格式将取决于所采用的拉压分解格式。

如果采用 Amor 等人的体积-偏应变分解, 式 2.27 中  $\mathbb{C}^+$  和  $\mathbb{C}^-$  参考沈等人<sup>[22]</sup>的推导可以写为:

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^+ &= KH(\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})) \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 3} \\ \mathbf{0}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 3} \end{bmatrix} + 2\mu \left( \mathbf{I}_{6 \times 6} - \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 3} \\ \mathbf{0}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 3} \end{bmatrix} \right), \\ \mathbb{C}^- &= KH(-\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})) \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 3} \\ \mathbf{0}_{3 \times 3} & \mathbf{0}_{3 \times 3} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.28)$$

其中,  $\mathbf{E}_{3 \times 3}$  是一个全 1 矩阵,  $\mathbf{I}_{6 \times 6}$  是  $6 \times 6$  的单位矩阵。

相反, 如果采用 Miehe 等人<sup>[9]</sup>的谱分解格式, 可以得到:

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^{\pm} &= \lambda H(\pm \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})) \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \sum_{a=1}^3 H(\pm \boldsymbol{\varepsilon}_a) \mathbb{Q}_a \\ &+ \mu \sum_{b \neq a, \boldsymbol{\varepsilon}_a \neq \boldsymbol{\varepsilon}_b}^3 \frac{\langle \boldsymbol{\varepsilon}_a \rangle_{\pm} - \langle \boldsymbol{\varepsilon}_b \rangle_{\pm}}{\boldsymbol{\varepsilon}_a - \boldsymbol{\varepsilon}_b} (\mathbb{G}_{ab} + \mathbb{G}_{ba}) \\ &+ \mu \sum_{b \neq a, \boldsymbol{\varepsilon}_a = \boldsymbol{\varepsilon}_b}^3 H(\pm \boldsymbol{\varepsilon}_a) (\mathbb{G}_{ab} + \mathbb{G}_{ba}) \end{aligned} \quad (2.29)$$

这里用到的 Heaviside 函数定义为<sup>[23, 24]</sup>

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \frac{1}{2} & x = 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad (2.30)$$

四阶张量  $\mathbb{Q}_a$  和  $\mathbb{G}_{ab}$  定义为

$$\begin{aligned} (\mathbb{Q}_a)_{ijkl} &= (\mathbf{M}_a)_{ij}(\mathbf{M}_a)_{kl} \\ (\mathbb{G}_{ab})_{ijkl} &= (\mathbf{M}_a)_{ik}(\mathbf{M}_b)_{jl} + (\mathbf{M}_a)_{il}(\mathbf{M}_b)_{jk} \end{aligned} \quad (2.31)$$

其中  $\mathbf{M}_a = \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{n}_a$ 。公式 2.29 的简要推导以及代码实现可参考附录 A。

对于动态断裂，时间离散采用隐式的 HHT- $\alpha$  算法<sup>[25]</sup>。定义  $\mathbf{v}_n = \dot{\mathbf{u}}_n$ ，以及  $\mathbf{a}_n = \ddot{\mathbf{u}}_n$ ，该算法可以写为

$$\mathbf{u}_{n+\alpha_f} = \mathbf{u}_n + \alpha_f(\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n) \quad (2.32)$$

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + \Delta t((1-\gamma)\mathbf{a}_n + \gamma\mathbf{a}_{n+1}) \quad (2.33)$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t\mathbf{v}_n + \frac{(\Delta t)^2}{2}((1-2\beta)\mathbf{a}_n + 2\beta\mathbf{a}_{n+1}) \quad (2.34)$$

其中，时间步长  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ ，依赖于网格尺寸  $h$  以及瑞利波速  $V_R$ ，即对于 staggered 算法  $\Delta t \leq h/V_R$ 。其中的时间积分参数定义为：

$$\alpha \in \left[-\frac{1}{3}, 0\right], \quad \alpha_f = 1 + \alpha, \quad \beta = \frac{(1-\alpha)^2}{4}, \quad \gamma = \frac{1-2\alpha}{2} \quad (2.35)$$

## 2.3 混合自适应相场方法的一般框架

### 2.3.1 细化域识别策略

自适应有限元相场法的核心之一就是识别需要进行细化的区域。一种容易想到的方法是跟踪裂纹尖端的传播路径。然而，想要准确定位裂纹尖端是非常困难的，特别是对于多分支裂纹<sup>[4]</sup>。为此，我们引入了一种新颖且易于使用的自适应策略，不需要精确定位裂纹尖端，如图 2.3 所示。首先指定一个临界的相场值  $\phi_R$ （这里采用  $\phi_R = 0.25$ ），其被视为网格细化启动的开关。基于此，相场值满足  $\phi \geq \phi_R$  的节点将被标记。对于任意两个相邻的时间步长，时间  $t$  和下一个时间步  $t + \Delta t$  对应的被标记的节点分别表示为  $P_t$  和  $P_{t+\Delta t}$ 。因此，在每一个时间步增加的标记节点  $P_\Delta = P_{t+\Delta t} \setminus P_t$  可以被粗略当作裂纹尖端（图 2.3 中虚线包围的区域）。以任意的  $\forall P_\Delta^j(x_j, y_j) \in P_\Delta$  作为几何中心，我们定义一个矩形区域

$$\Omega_R^j = \left\{ (x, y) \in \Omega : \left[ |x - x_j| \leq R_x \wedge |y - y_j| \leq R_y \right] \right\} \quad (2.36)$$

其中  $R_x(R_y)$  定义为矩形  $\Omega_R^j$  的长度(高度)的一半。对于所有属于集合  $P_\Delta$  的节点, 方程 2.36 所定义的操作都将被执行。这将生成一系列的有交叠区域的集合  $\Omega_R^j, j=1,2,3\dots|P_\Delta|$ , 而完整的细化区域  $\Omega_R$  就是这些集合的合集。

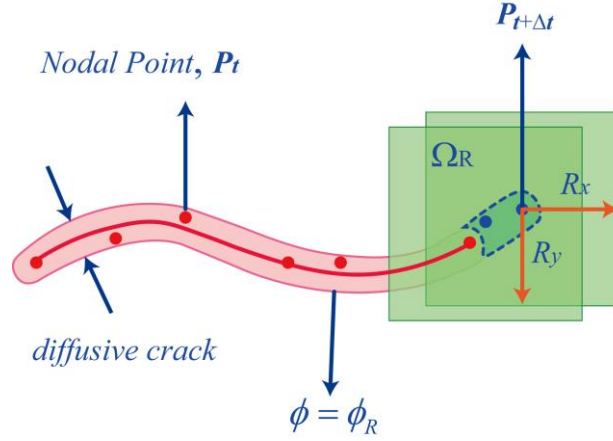


图 2.3 确定细化区域的示意图。

原则上,  $R_x(R_y)$  应该大于裂纹在一个加载步长的传播距离(动态情况下的时间步长)。然而, 考虑到准静态断裂模拟的缓慢加载特性和动态断裂的微小时间步长,  $R_x$  或  $R_y$  被定义为

$$h_{coarse} \leq R_x, R_y \leq 2h_{coarse}, (4h_{fine} \leq h_{coarse} \leq 16h_{fine}) \quad (2.37)$$

其中  $h_{coarse}$  和  $h_{fine}$  分别代表粗网格和细网格的长度, 应该大于裂纹在一个加载步长的传播距离(动态情况下的时间步长)。注意, 式 2.37 不是强制性的, 更大的细化区域也是可行的。我们的数值结果显示, 当前的策略兼具高精度以及较低的计算开销。

### 2.3.2 多级混合自适应网格

除了细化域的确定外, 网格细化的具体方案对计算成本和计算精度也有决定性的影响, 这促使我们开发更高效的网格细化算法。在图 2.4 中, 我们展示了所提出的多级混合自适应网格的基本操作流程。原始几何域由较大的四边形单元离散(图 2.4(a)), 其中单元级别定义为 0 (根单元)。按照上一小节的方法标记的四边形单元, 被等分为两个单元级别为 1 的三角形单元(子单元), 如图 2.4(b)所示。类似地, 将两个三角形单元进一步划分为四个较小尺度的三角形单元(见图 2.4(c)), 并重复此操作, 直到达到指定的细化级别(见图 2.4(d))。此外, 二叉树型的单元细化级别 ( $E_{Level}$ ) 数据如图 2.4 (f)所示。

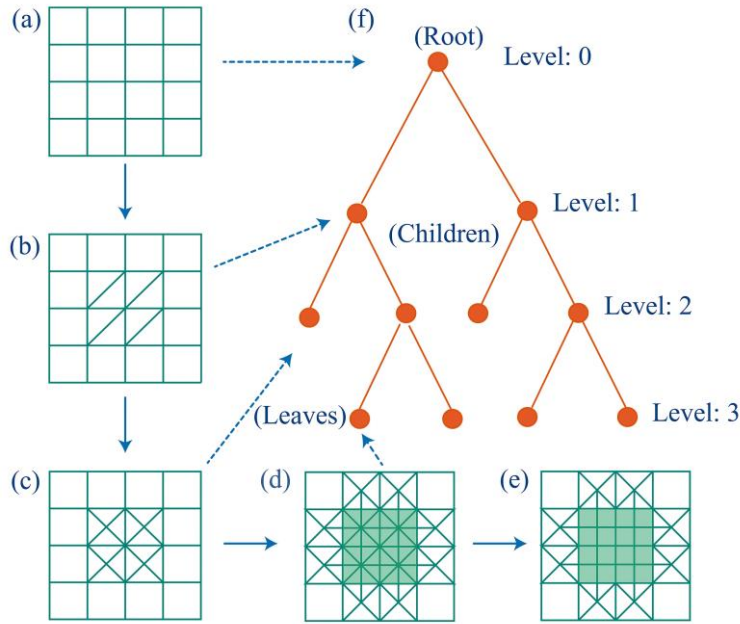


图 2.4 多级自适应混合 T3/Q4 单元策略的基本操作流程。

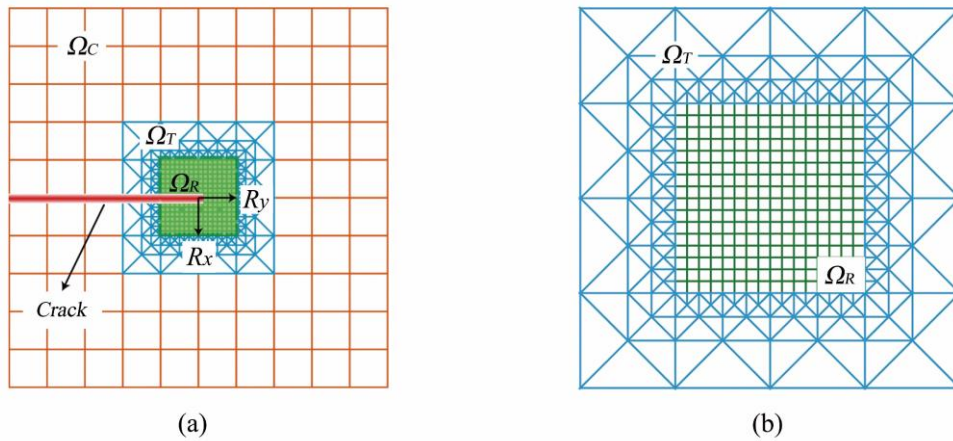


图 2.5 (a) 最终混合自适应网格的一般配置；(b) 细化和过渡区域的放大图。

回顾图 2.4(d)和(e)，我们注意到一个重要的特征，即两个细化级别最高的三角形元素可以再次转换为一个四边形元素。根据上述方案，最终的混合自适应网格的一般配置如图 2.5(a)所示。整个离散区域被划分为三个子区域，即，粗尺度区域  $\Omega_C$ ，细化区域  $\Omega_R$  以及过渡区域  $\Omega_T$ 。考虑到计算精度和效率，区域  $\Omega_C$  和  $\Omega_R$  的离散采用线性四边形单元，而区域  $\Omega_T$  采用线性三角形单元。其中， $\Omega_C$  和  $\Omega_T$  的局部放大如图 2.5(b)所示，显示了一个重要的特征，即区域  $\Omega_T$  的  $E_{Level}$  逐渐从 0 增加到  $\Omega_C$  区域的最大值（比如图 2.5(b)中的最大值为 8）。这一改进方法巧妙地消除了多尺度网格中存在的悬挂节点，不仅极大降低了计算开销，也避免了非物理的边界反射波。此外，我们发展了一个网格粗化策略来进一步节省计算资

源，这是由下面的逻辑数组决定：

$$C_{Logical} = [\phi_E^{\max} \leq \phi_C \wedge E_{Level} \geq 1] \quad (2.38)$$

其中， $\phi_C$  是一个比较低的临界相场值 ( $\phi_C = 0.1$ )， $\phi_E^{\max}$  是一个单元中的节点相场值的最大值， $E_{Level}$  是单元的细化级别。  $C_{Logical}$  是逻辑变量，该参数用于确定当前单元是否需要网格粗化。简而言之，网格粗化是细化的逆操作，具体的网格自适应演化将在数值结果部分展示。

### 2.3.3 基本操作流程

我们在前一节中已经介绍了 *ha*-PFM 的核心算法，其在动态条件下的整个求解过程被总结如下：

#### 求解流程

1. 采用四边形单元离散初始计算域  $\Omega$ ，所有单元级别  $E_{Level} = 0$ 。
2. 通过复制节点方法创建预裂纹，采用多级网格对近裂纹尖端  $\Omega_R$  细化。
3. 设置材料参数，HHT- $\alpha$  积分参数，以及初始相场值  $\phi_0$ ，位移场  $\mathbf{u}_0$  应变历史场  $\mathcal{H}_0$  在  $t_0 = 0$ 。
4. 对于每一个时间步  $[t_n, t_{n+1}]$ ，我们执行如下的 staggered 策略：
  - 4.1. 构建全局刚度矩阵  $\mathbf{K}^u$ ， $\mathbf{K}^{\phi}$  以及残余矢量  $\mathbf{R}^u$ ， $\mathbf{R}^{\phi}$ 。
  - 4.2. 更新相场值  $\phi_{n+1}^{i+1}$ ，位移  $\mathbf{u}_{n+1}^{i+1}$  通过

$$\begin{cases} \mathbf{K}_{i+1}^{\phi} \Delta \phi = -\mathbf{R}_{i+1}^{\phi}, \tilde{\mathbf{K}}_{i+1}^u \Delta \mathbf{u} = -\tilde{\mathbf{R}}_{i+1}^u \\ \phi_{n+1}^{i+1} = \phi_{n+1}^i + \Delta \phi, \mathbf{u}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{u}_{n+1}^i + \Delta \mathbf{u} \end{cases} \quad (2.39)$$

其中

$$\tilde{\mathbf{K}}^u = \frac{1}{\beta \Delta t^2} \tilde{\mathbf{M}} + \alpha_f \mathbf{K}^u \quad (2.40)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}^u = (1 - \alpha_f) \mathbf{R}^u + \frac{1}{\beta \Delta t^2} \tilde{\mathbf{M}}(\mathbf{u}_n + \Delta t \mathbf{v}_n + \frac{\Delta t^2}{2} (1 - 2\beta) \mathbf{a}_n) \quad (2.41)$$

- 4.3. 收敛准则定义为

$$\max \left\{ \frac{\|\tilde{\mathbf{R}}_{i+1}^u\|}{\|\tilde{\mathbf{R}}_0^u\|}, \frac{\|\mathbf{R}_{i+1}^{\phi}\|}{\|\mathbf{R}_0^{\phi}\|} \right\} \leq tol \quad (2.42)$$

这里  $\|\cdot\|$  表示欧几里得范数，容差  $tol = 10^{-4}$  被设置。

- 4.4. 更新速度场  $\mathbf{v}_{n+1}$  以及加速度场  $\mathbf{a}_{n+1}$  根据方程 2.39-41。
- 4.5. 更新应变历史场  $\mathcal{H}_0$  依照方程 2.20。
- 4.6. 终止当前时间步。
5. 运行自适应网格模块

- 5.1. 对节点满足逻辑运算（方程 2.30）的单元执行网格粗化策略。
- 5.2. 识别和标记细化单元。
- 5.3. 运行网格细化模块。
6. 进入下一个时间步并重复操作 4 (4.1-4.6)。
7. 数据后处理和可视化。

上述求解流程完全在 MATLAB R2018a 中编程。为了提高计算效率，将刚度矩阵和剩余向量组装并行化，并在求解器中调用 MATLAB 编码器(C/CPP 程序生成器)。方程 2.39 中存在稀疏系数矩阵，其计算采用双共轭梯度法并以不完全 LU 分解作为预处理因子。此外，当前工作中所有示例的代码都是在处理器为 Intel(R) Xeon E5-2680 V3 CPU@2.5 GHz 的工作站上执行的。

## 2.4 数值结果

在本节中，我们应用 *ha*-PFM 重新测试了准静态和动态断裂的几个基准算例（所有计算均基于平面应变假设）。(i) 分别在拉力和剪力作用下单边缺口板的裂纹扩展。(ii) 承受循环载荷的 L 形板的裂纹成核。(iii) 缺陷（例如孔）对裂纹扩展路径的影响。(iv) 模拟经典的 Kalthoff 测试中裂纹扩展。(v) 在动态单轴张力下含预裂纹的矩形板的裂纹分叉。

### 2.4.1 准静态断裂测试

#### (i) 单边切口的拉伸以及剪切测试

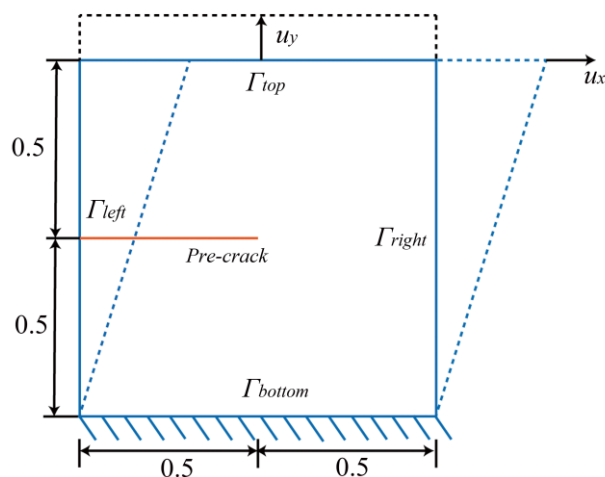


图 2.6 单侧切口拉伸和剪切试验的几何和边界条件说明(单位:mm)。

在该示例中，我们考虑在左边缘的中间高度包含长度为 0.5 mm 的水平预裂

纹的正方形板 ( $1\text{mm}\times 1\text{mm}$ ), 如图 2.6 所示。该板试件的材料参数设置为  $E = 210\text{ GPa}$ ,  $\nu = 0.3$  以及  $G_c = 2.7\times 10^{-3}\text{ N/mm}$ <sup>[23]</sup>。裂纹的传播是由顶部边缘 ( $\Gamma_{top}$ ) 拉伸 (I 型断裂) 或剪切 (II 型断裂) 加载引起的。左 ( $\Gamma_{left}$ ) 右 ( $\Gamma_{right}$ ) 边缘自由, 而底部边缘被固定 ( $\Gamma_{bottom}$ )。对于 I 型加载测试, 相场正则化参数被设置为  $l_0 = 0.0133\text{ mm}$ , 初始的几何被离散通过 625 ( $25\times 25$ ) 个粗尺度的四边形单元。在 *ha*-PFM 自适应细化策略中, 一个粗尺度单元被分割为 ( $16\times 16$ ) 的细尺度的三角形单元, 其进一步被转换为  $8\times 8$  的四边形单元。边界  $\Gamma_{top}$  的位移通过前 500 步增量为  $\Delta u_y = 1\times 10^{-5}\text{ mm}$ , 之后为  $\Delta u_y = 1\times 10^{-6}\text{ mm}$  来控制<sup>[23]</sup>。图 2.7 展示了三种不同变形阶段的断裂形态及相应的混合自适应网格, 分别是  $u_y = 5.7\times 10^{-3}\text{ mm}$  (FIG. 6(a)),  $u_y = 5.9\times 10^{-3}\text{ mm}$  (图 2.7(b)) 以及  $u_y = 6.1\times 10^{-3}\text{ mm}$  (图 2.7(c))。自适应网格的演化表明, 细化区域沿裂纹尖端扩展路径扩展, 满足方程 2.30 的非裂纹尖端区域将被粗化。

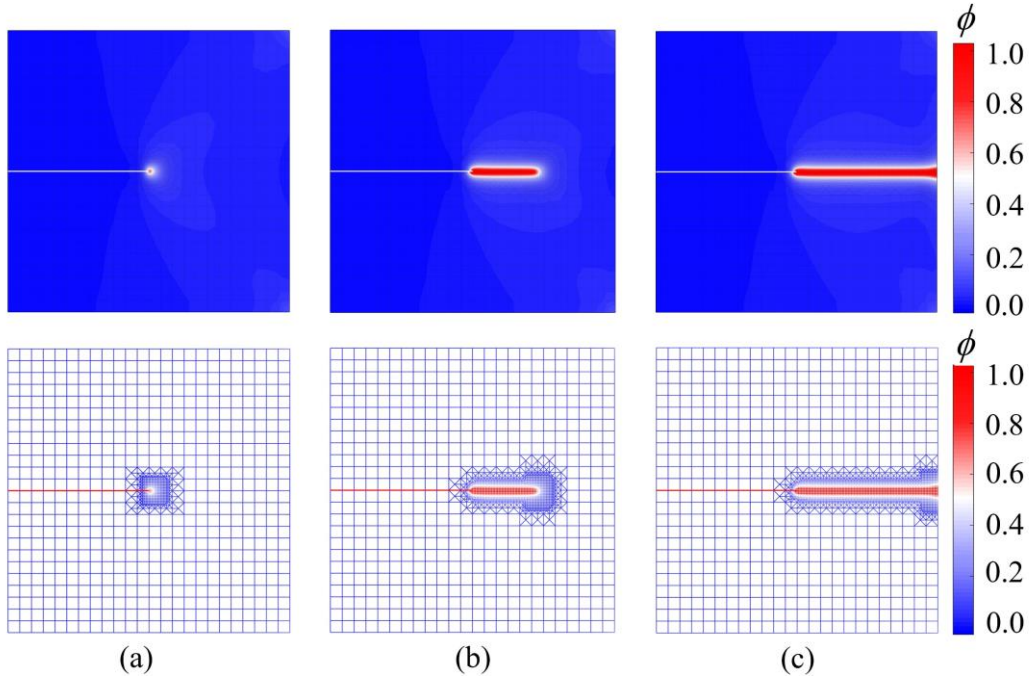


图 2.7 加载位移分别为  $u_y = 5.7\times 10^{-3}\text{ mm}$  (a),  $u_y = 5.9\times 10^{-3}\text{ mm}$  (b) 以及  $u_y = 6.1\times 10^{-3}\text{ mm}$  (c) 时对应的裂纹花样和相应的自适应网格。

采用与图 2.7 所示的完全相同的几何配置, 我们使用 *ha*-PFM 对纯剪切载荷下的裂纹演化也进行了重新研究。除了  $l_0$  被设置为  $0.004\text{ mm}$  之外, 其余的参数均保持不变。整个计算域被离散为 1225 个粗尺度的四边形单元, 与上一个算例相同的自适应策略被采用。不同于拉伸测试, 当前算例采用完全均匀的时间步长  $\Delta u_x = 1\times 10^{-5}\text{ mm}$ 。如图 2.8 所示, *ha*-PFM 产生了与文献几乎完全一致的裂纹模式<sup>[9, 17]</sup>。



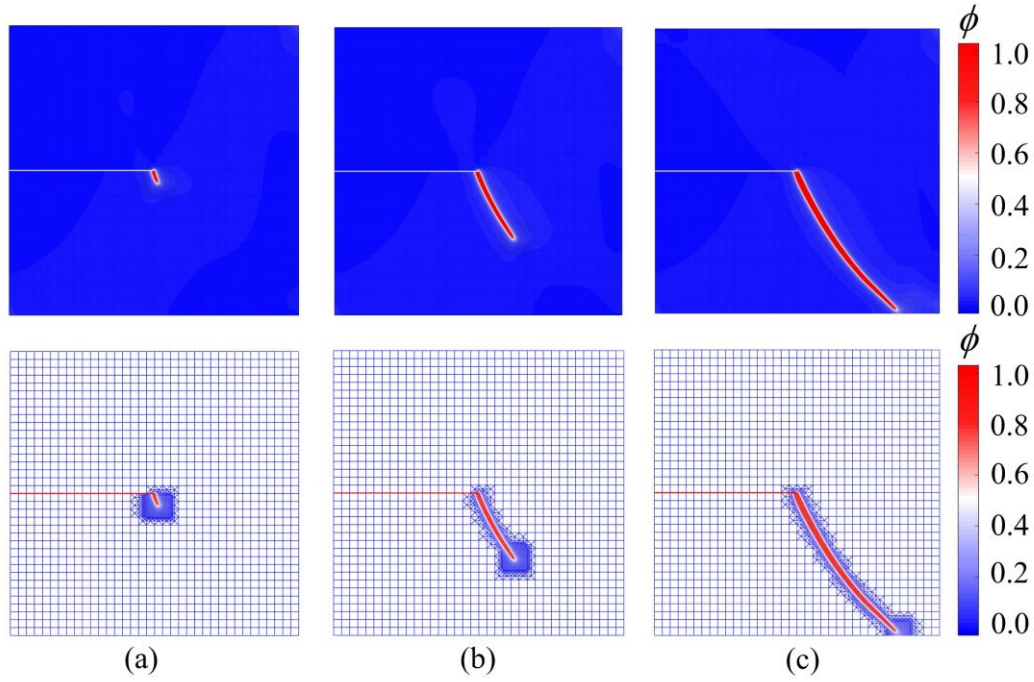


图 2.8 加载分别为  $u_y = 1.2 \times 10^{-2}$  mm (a),  $u_y = 1.5 \times 10^{-2}$  mm (b) 以及  $u_y = 1.7 \times 10^{-2}$  mm 的剪切试验的裂纹形态和相应的混合自适应网格。

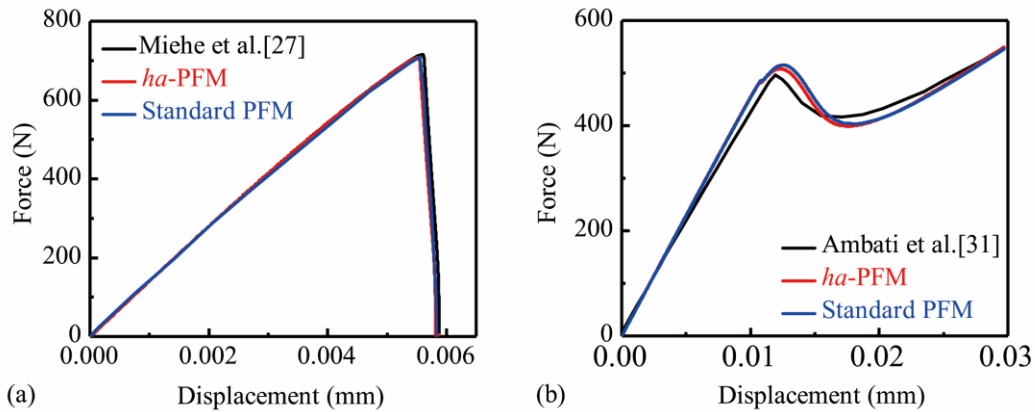


图 2.9 (a) Mode-I 加载和 (b) Mode-II 加载下的单边切口试件的载荷-位移曲线。

为了验证  $ha$ -PFM 的合理性和准确性，我们通过标准的 PFM 计算了以上两个示例，这对于模式 I 加载需要 40000 个均匀的四边形单元，对于模式 II 则需要 78400 个单元。通过  $ha$ -PFM 和标准的 PFM 获得的载荷-位移曲线在图 2.9 中给出，且其与 Mische 等人<sup>[17]</sup>和 Ambati 等人<sup>[26]</sup>的结果非常吻合。此外，利用  $ha$ -PFM 进行的模式 I 和 II 断裂测试的总计算时间分别为 21.7 分钟和 69.3 分钟，而对于标准的 PFM，它们分别约为 591 分钟和 1150 分钟。显然， $ha$ -PFM 显著降低了计算成本且不损失精度，这比标准的 PFM 快了约 15 至 30 倍。

(ii) L 形板测试

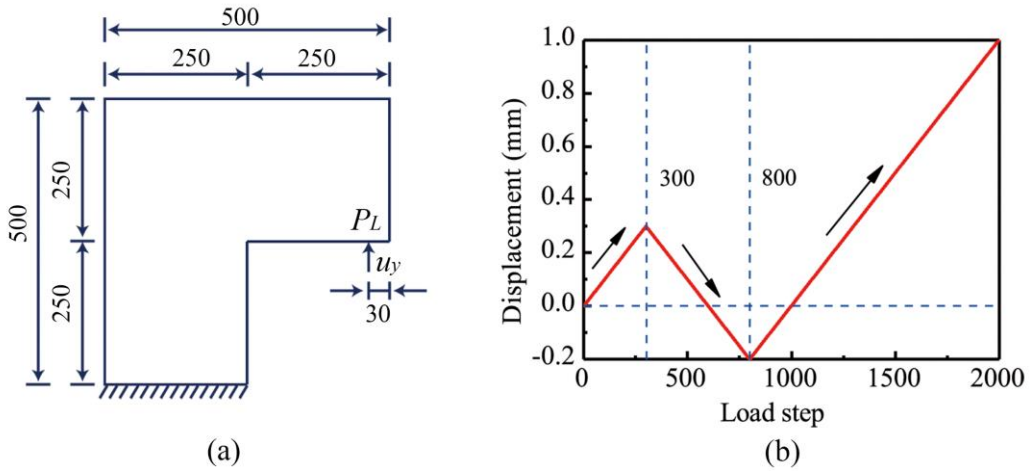


图 2.10 L 形板测试; (a) 几何形状和边界条件 (以毫米为单位), (b) 位移加载历史。

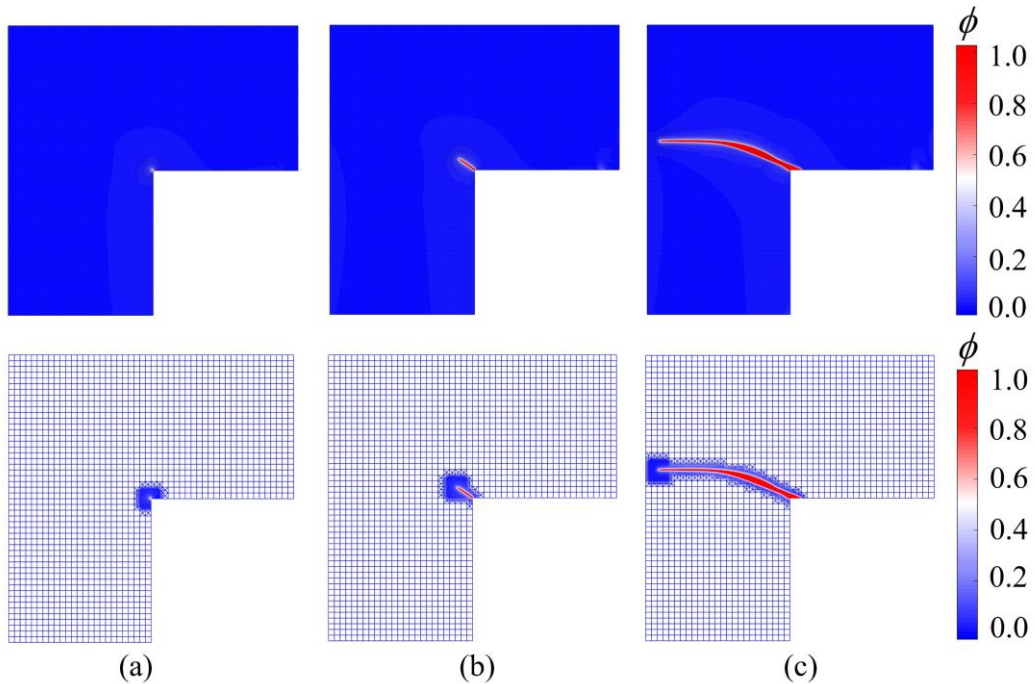


图 2.11 位移载荷分别为  $u_y = 0.22 \text{ mm}$  (a),  $u_y = 0.3 \text{ mm}$  (b) and  $u_y = 1 \text{ mm}$  (c) 的 L 形板测试的裂纹形貌及相应的混合自适应网格。

在此测试中, 我们模拟了一个已经被试验广泛研究过的一个 L 形板的裂纹成核和扩展过程 [4,26]。图 2.10(a)展示了受到基础约束以及点  $P_L$  受垂直位移加载的几何形状和边界条件。一个恒定的位移增量  $\Delta u_y = 1 \times 10^{-3} \text{ mm}$  被施加, 如图 2.10(b)所示。为了匹配文献中的结果 [4], 材料参数被设置为  $\lambda = 6.16 \text{ GPa}$ ,  $\mu = 10.95 \text{ GPa}$ ,  $G_c = 8.9 \times 10^{-5} \text{ kN/mm}$  以及  $l_0 = 1.18 \text{ mm}$ 。采用 7500 个粗尺度的四边形单元对 L 形几何进行离散, 其中细化区域的粗四边形元进一步划分为

64 (8×8) 的小尺度单元。注意，在这个试验中施加了一个循环荷载，可以验证 *ha*-PFM 处理压缩裂纹闭合的能力。图 2.11 给出了在  $u_y = 0.22$  mm, 0.3 mm 以及 1 mm 三种加载状态下的裂纹扩展模式及相应的混合自适应网格，其与实验结果吻合较好。图 2.12 展示了我们的方法得到的 L 形板测试的荷载-位移曲线以及 Singh 等人<sup>[4]</sup>所报道的结果。显然，两条曲线是基本一致的。

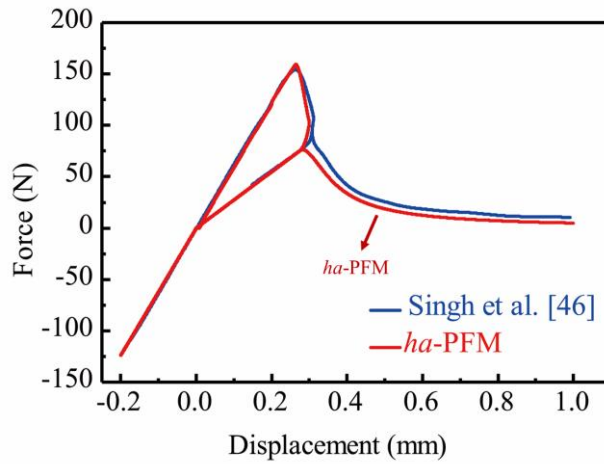


图 2.12 L 形板试验的荷载-位移曲线。

### (iii) 含孔的缺口板

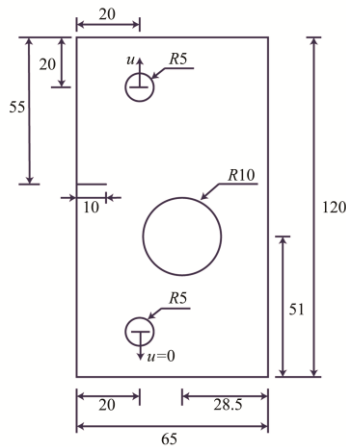


图 2.13 含孔缺口板的几何和边界设置。

这个算例来自于一个实验配置<sup>[26]</sup>，该实验旨在检验缺陷，如孔洞，对裂纹扩展路径的影响。图 2.13 给出了该算例的物理模型以及与文献一致边界设置<sup>[26]</sup>。基本的材料参数被设置为  $\lambda = 1.94$  GPa,  $\mu = 2.45$  GPa,  $G_c = 2.28 \times 10^{-3}$  kN/mm 以及  $l_0 = 0.1$  mm。初始计算域由 2330 个粗尺度四边形单元组成，处于裂纹生长路径上的每个粗尺度四边形单元被分割成 8×8 的细尺度单元。将靠下的圆孔固定，并在上部的孔上施加固定增量为  $1 \times 10^{-3}$  mm 的位移控制载荷，如图 2.13 所示。四个不同的加载为  $u_y = 0.76$  mm (a),  $u_y = 0.89$  mm (b),  $u_y = 1.8$  mm (c) 以及

$u_y = 1.92$  mm (d) 的裂纹花样被展示在图 2.14 中。与文献的实验结果相比, *ha*-PFM 捕捉到几乎完全相同的裂纹路径<sup>[26]</sup>。另外, 我们用标准的 PFM 对算例也进行了重新测试, 其荷载-位移曲线与 *ha*-PFM 的曲线吻合较好, 如图 2.15 所示。

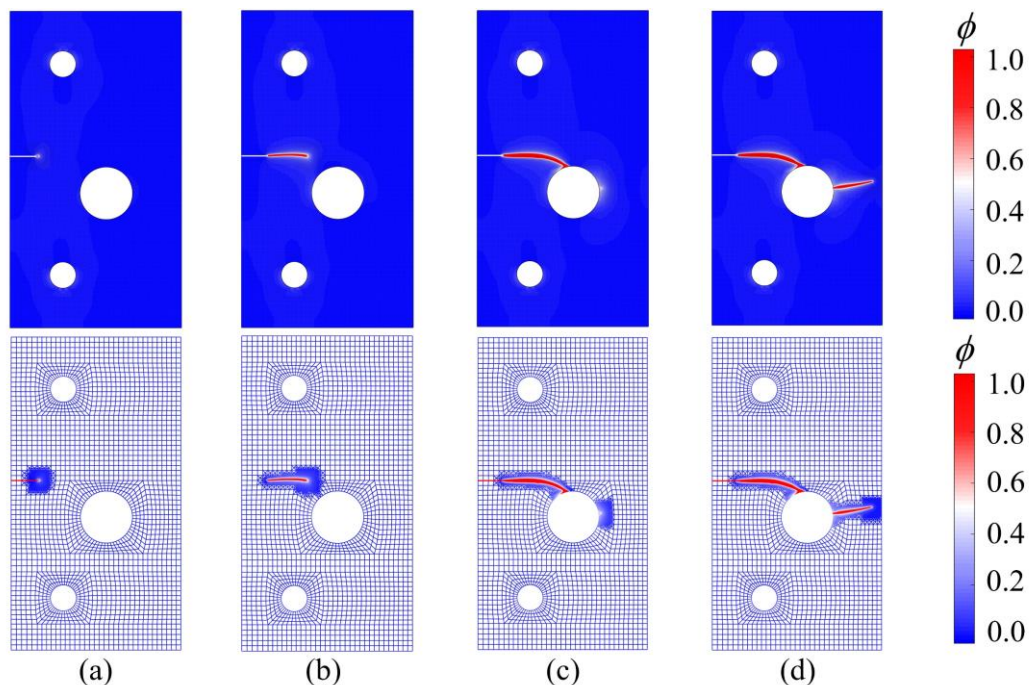


图 2.14 加载位移分别为  $u_y = 0.76$  mm (a),  $u_y = 0.89$  mm (b),  $u_y = 1.8$  mm (c) 以及  $u_y = 1.92$  mm (d) 的含孔缺口板的相场及相应的混合自适应网格。

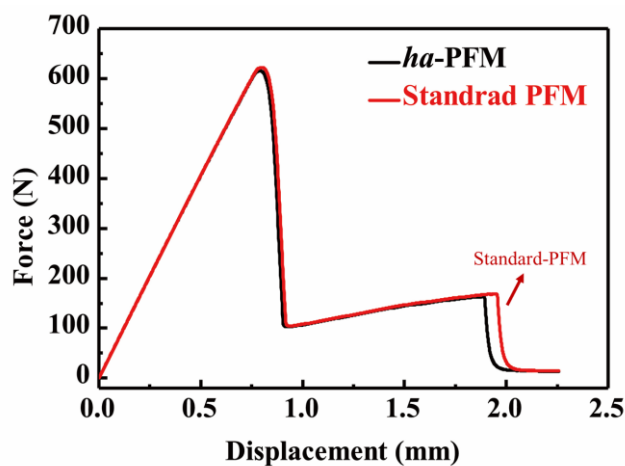


图 2.15 含孔缺口板的载荷-位移曲线。

## 2.4.2 动态断裂测试

### (iv) 动态 Kalthoff 测试

在此算例中, *ha*-PFM 被用于测试经典的 Kalthoff 实验, 该实验考虑一个具

有对称的预裂纹的样品受弹丸冲击的影响<sup>[27]</sup>。为了降低计算量，仅考虑二分之一的计算域，相应的几何和边界条件的示意图如图 2.16 所示。

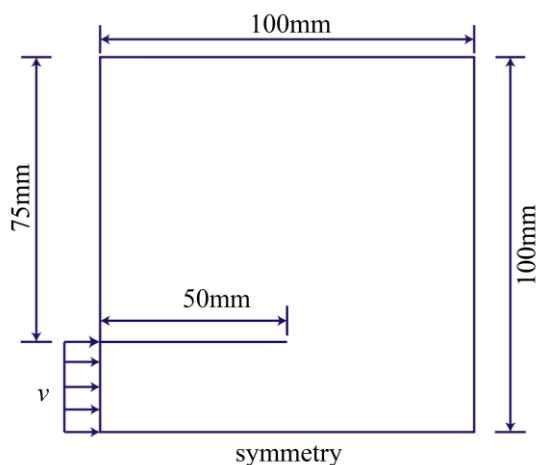


图 2.16 Kalthoff 测试的几何和边界条件的示意图。

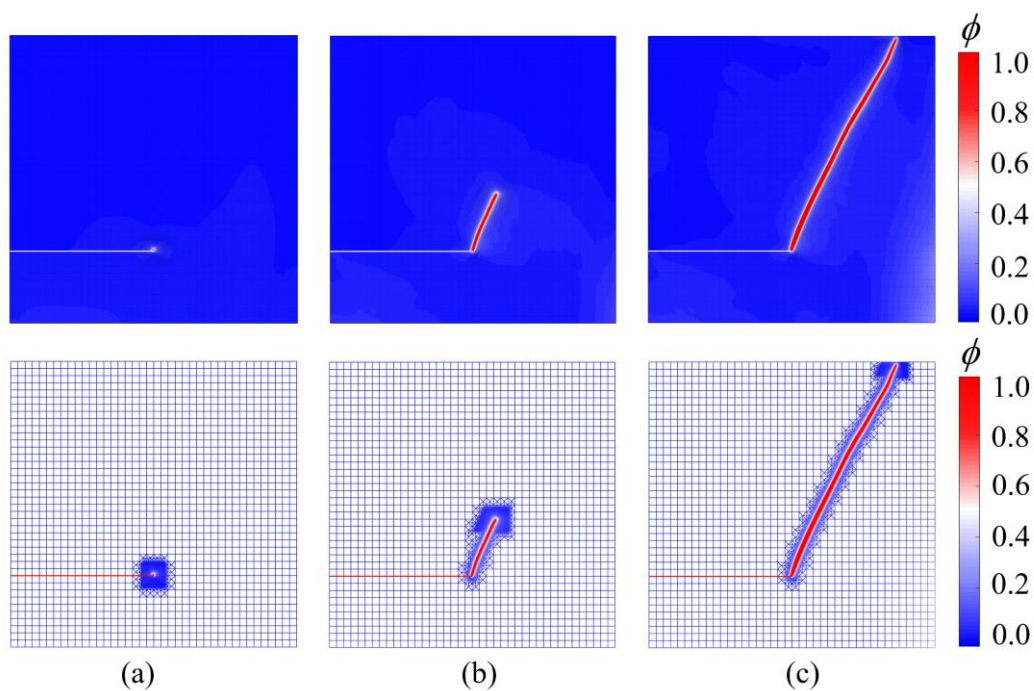


图 2.17 三个不同时刻的 Kalthoff 试验的裂纹模式和混合自适应网格。

所施加的速度边界条件定义为：

$$v = \begin{cases} \frac{t}{t_0} v_0 & t \leq t_0, \\ v_0 & t > t_0, \end{cases} \quad (2.43)$$

其中， $v_0 = 16.5 \text{ m/s}$ ， $t_0 = 1 \mu\text{s}$ 。已经有几种不同的数值方法对该实例进行了研究，

其中包括 PFM。根据之前的文献<sup>[28]</sup>，本算例的材料参数被设置为  $\rho = 8000 \text{ kg/m}^3$ ， $E = 190 \text{ GPa}$ ， $\nu = 0.3$ ， $G_c = 2.213 \times 10^4 \text{ J/m}^2$ ，其相应的瑞利波速为  $V_R = 2803 \text{ m/s}$ 。长度尺度被设置为  $V_R = 2803 \text{ m/s}$ ，其通过  $h_{fine} \approx l_0 / 2$  以及  $\Delta t \leq h_{fine} / V_R$  近似地决定了细化单元的尺度。涉及裂纹萌生 ( $t = 20 \text{ } \mu\text{s}$ )、生长 ( $t = 40 \text{ } \mu\text{s}$ )，完全断裂 ( $t = 85 \text{ } \mu\text{s}$ ) 三个不同的阶段的裂纹模式和相应的自适应网格如图 2.17 所示。裂纹扩展与水平方向的夹角约为  $66.5^\circ$ ，其与  $70^\circ$  的实验结果相当接近<sup>[27]</sup>。

### (v) 动态裂纹分叉

前面的测试包括准静态和动态断裂，都只研究了单个裂纹的成核和扩展。多裂纹演化模式是否仍然有效还需要进一步验证。在此动态试验中，我们将采用 *ha*-PFM 重新调查动态裂纹分叉的演化模式。图 2.18 描述了这个算例的几何形状和边界条件，一个包含预裂纹的脆性板受到上下边界的冲击载荷  $\sigma_y = 1 \text{ MPa}$ 。按照以往的文献<sup>[14]</sup>，材料参数被设置为  $\rho = 2450 \text{ kg/m}^3$ ， $E = 32 \text{ GPa}$ ， $\nu = 0.2$ ， $G_c = 3 \text{ J/m}^2$ 。其固有的瑞利波速为  $V_R = 2125 \text{ m/s}$ ，长度尺度被设置为  $l_0 = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}$ 。初始的求解域被离散为 4000 个粗单元，被标记的单元被细化为  $(8 \times 8)$  的子单元。时间步长仍然取决于网格尺寸和瑞利波速。

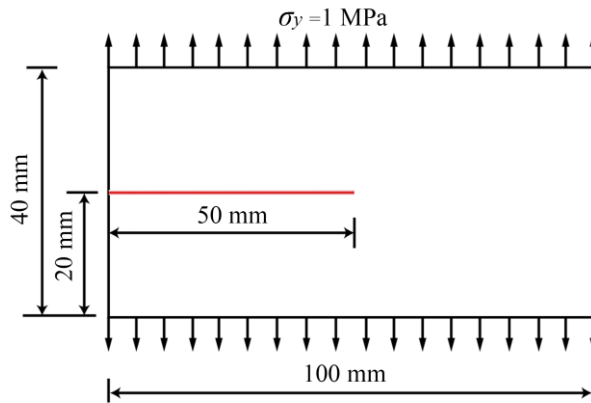


图 2.18 动态裂纹扩展试验的几何条件和边界条件。

图 2.19 展示了在时刻  $t = 20 \text{ } \mu\text{s}$  (a)， $t = 50 \text{ } \mu\text{s}$  (b) 以及  $t = 80 \text{ } \mu\text{s}$  (c) 的动态裂纹分叉的形态。由 *ha*-PFM 方法所求解的整个裂纹扩展路径与实验和文献结果基本一致。这个例子也经过了标准的 PFM 的测试，使用 256000 个均匀的四边形单元，计算时间为 650 分钟，而我们的方法最多只需要 25956 个混合单元，计算时间仅为 36 分钟，加速比达到 18 倍。将 *ha*-PFM 得到的裂纹尖端速度曲线与标准的 PFM 得到的裂纹尖端速度曲线一起绘制在图 2.19 中，两者之间的匹配是令人满意的。

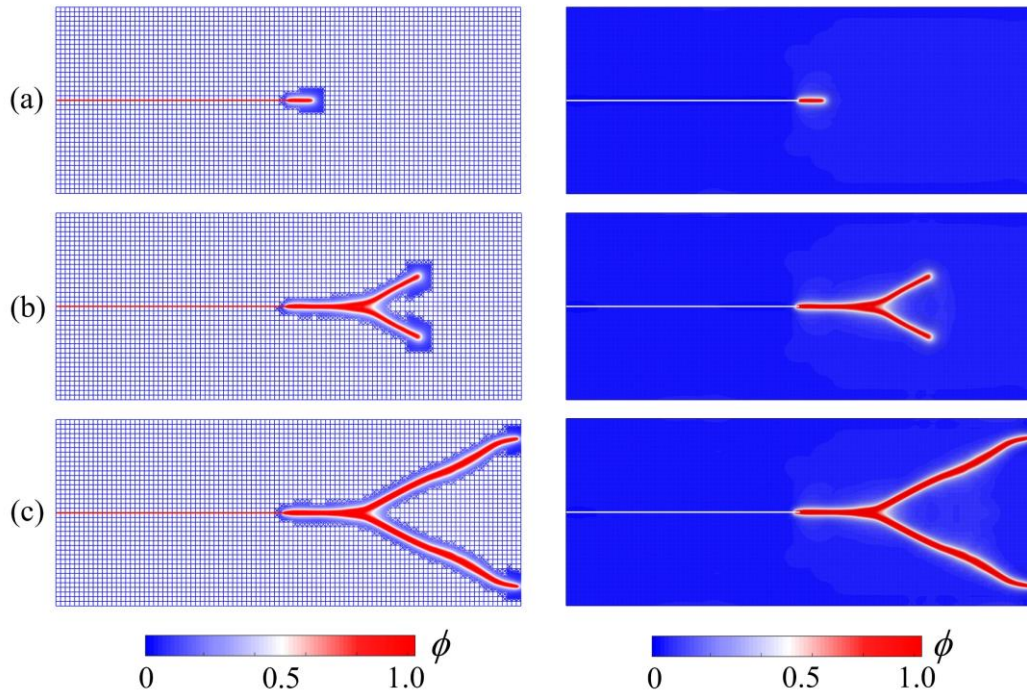


图 2.19 在  $t = 20 \mu\text{s}$  (a),  $t = 50 \mu\text{s}$  (b) 以及  $t = 80 \mu\text{s}$  (c) 的动态裂纹分叉的相场演化以及混合自适应网格。

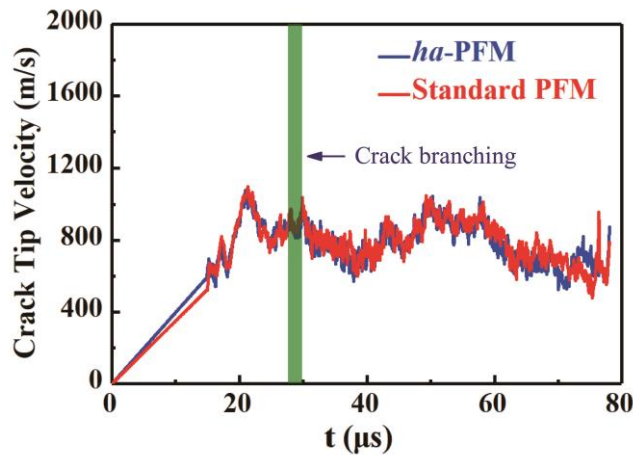


图 2.20  $ha$ -PFM 以及标准的 PFM 计算的裂纹尖端速度随时间演化的对比。

## 2.5 小结

本章节针对脆性断裂的相场建模开发了一种名为  $ha$ -PFM 的自适应有限元网格离散策略。 $ha$ -PFM 包括自适应尖端追踪算法以及多级混合 T3/Q4 单元离散策略。其中，基于这项工作中提出的一个创新策略，通过数值跟踪裂纹尖端的近似位置来识别细化区域。网格细化区域随着裂纹扩展进行动态的推进（基于自适应单元细化与粗化算法）。不同于以往的自适应策略，T3 单元仅离散化连接精细区域和粗糙区域的过渡区域，从而消除了悬挂节点，并确保裂纹尖端附近网格的高度各向同性。除此之外，数值结果表明  $ha$ -PFM 可以极大地节省内存，并且

比标准 PFM 快 15 至 30 倍，而不会损失精度。

## 附录 四阶弹性张量的推导与代码实现

```
function [C, stress_p, stress_vector, phi] = Mische_model(strain_tensor, Phase, lame_1, lame_2, K)
% C -- fourth order tensor; phi -- strain energy;
V2=[1,1,2,2;1,2];
heav=@(X) 1/2*(X==0)+1*(X>0);
[eig_vec, eig_val]=eig(strain_tensor);
eigenvalues_p=eig_val;
eigenvalues_p(eigenvalues_p<0)=0;
eigenvalues_n=eig_val-eigenvalues_p;
trace_strain=eig_val(1,1)+eig_val(2,2);
J=[1,1,0;1,1,0;0,0,0];
C=((1-Phase)^2 + K)*lame_1*heav(trace_strain)*J+lame_1*heav(-trace_strain)*J;
trace_strain_p=trace_strain;
trace_strain_p(trace_strain_p<0)=0;
trace_strain_n=trace_strain-trace_strain_p;
stress_tensor_p=zeros(2,2);
stress_tensor_n=zeros(2,2);
phi_p=lame_1/2*trace_strain_p^2+lame_2*(eigenvalues_p(1,1)^2+eigenvalues_p(2,2)^2);
phi_n=lame_1/2*trace_strain_n^2+lame_2*(eigenvalues_n(1,1)^2+eigenvalues_n(2,2)^2);
phi=((1-Phase)^2 + K)*phi_p+phi_n;
for s=1:2
    stress_tensor_p=stress_tensor_p+2*lame_2*eigenvalues_p(s,s)*eig_vec(:,s)*eig_vec(:,s);
    stress_tensor_n=stress_tensor_n+2*lame_2*eigenvalues_n(s,s)*eig_vec(:,s)*eig_vec(:,s);
end
stress_tensor_p=stress_tensor_p+lame_1*trace_strain_p*eye(2);
stress_tensor_n=stress_tensor_n+lame_1*trace_strain_n*eye(2);
stress_tensor=((1-Phase)^2 + K)*stress_tensor_p+stress_tensor_n;
stress_p=[stress_tensor_p(1,1);stress_tensor_p(2,2);stress_tensor_p(1,2)];
stress_vector=[stress_tensor(1,1);stress_tensor(2,2);stress_tensor(1,2)];
for m=1:3
    for n=m:3
        for a=1:2
            HEA_P=heav(eig_val(a,a));
            HEA_N=heav(-eig_val(a,a));
            TP_1=2*lame_2*HEA_P*eig_vec(V2(m,1),a)*eig_vec(V2(m,2),a)*eig_vec(V2(n,1),a)*
            eig_vec(V2(n,2),a);
            TN_1=2*lame_2*HEA_N*eig_vec(V2(m,1),a)*eig_vec(V2(m,2),a)*eig_vec(V2(n,1),a)*
            eig_vec(V2(n,2),a);
            C(m,n)=C(m,n)+((1-Phase)^2 + K)*TP_1+TN_1;
            for b=1:2
                if (eig_val(a,a)~=eig_val(b,b) && a~=b)
                    TEN1=(eig_vec(V2(m,1),a)*eig_vec(V2(m,2),b)*eig_vec(V2(n,1),a)*eig_vec(V2(n,2),b));
                    TEN2=(eig_vec(V2(m,1),a)*eig_vec(V2(m,2),b)*eig_vec(V2(n,1),b)*eig_vec(V2(n,2),a));
                    TP_2=lame_2*(eigenvalues_p(a,a)-eigenvalues_p(b,b))/(eig_val(a,a)-
                    eig_val(b,b))*(TEN1+TEN2);
                    TN_2=lame_2*(eigenvalues_n(a,a)-eigenvalues_n(b,b))/(eig_val(a,a)-
                    eig_val(b,b))*(TEN1+TEN2);
                    C(m,n)=C(m,n)+((1-Phase)^2 + K)*TP_2+TN_2;
                elseif (eig_val(a,a)==eig_val(b,b) && a~=b)
                    HEA_P=heav(eig_val(a,a));
                    HEA_N=heav(-eig_val(a,a));
                    TEN1=(eig_vec(V2(m,1),a)*eig_vec(V2(m,2),b)*eig_vec(V2(n,1),a)*eig_vec(V2(n,2),b));
                    TEN2=(eig_vec(V2(m,1),a)*eig_vec(V2(m,2),b)*eig_vec(V2(n,1),b)*eig_vec(V2(n,2),a));
                    TP_3=lame_2*HEA_P*(TEN1+TEN2);
                    TN_3=lame_2*HEA_N*(TEN1+TEN2);
                    C(m,n)=C(m,n)+((1-Phase)^2 + K)*TP_3+TN_3;
                end
            end
        end
    end
end
end
C=(C+C')/2;
end
```

图 2.21 用于计算弹性张量、应力和应变能的 Matlab 代码。



在 Miehe 等人所提出的谱分解框架下，总的应变依照公式 2.6 被分为正负两部分，即， $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_+ + \boldsymbol{\varepsilon}_-$ 。为了推导四阶弹性张量  $\mathbb{C}$ ，建立了总应变到正、负分量的映射的投影张量  $\mathbb{P}^\pm$  被引入，即  $\boldsymbol{\varepsilon}_\pm = \mathbb{P}^\pm : \boldsymbol{\varepsilon}$ 。这里的投影张量给出如下

$$\mathbb{P}^\pm = \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}[\boldsymbol{\varepsilon}^\pm(\boldsymbol{\varepsilon})] = \sum_{a=1}^3 H(\pm \boldsymbol{\varepsilon}_a) \mathbb{Q}_a + \frac{1}{2} \sum_a^3 \sum_{b \neq a}^3 \theta_{ab} (\mathbb{G}_{ab} + \mathbb{G}_{ba}) \quad (2.44)$$

其中

$$\theta_{ab} = \begin{cases} \frac{\langle \boldsymbol{\varepsilon}_a \rangle_\pm - \langle \boldsymbol{\varepsilon}_b \rangle_\pm}{\boldsymbol{\varepsilon}_a - \boldsymbol{\varepsilon}_b} & \text{if } \boldsymbol{\varepsilon}_a \neq \boldsymbol{\varepsilon}_b \\ H(\pm \boldsymbol{\varepsilon}_a) & \text{if } \boldsymbol{\varepsilon}_a = \boldsymbol{\varepsilon}_b \end{cases} \quad (2.45)$$

依照链式法则，四阶弹性张量可以写为

$$\begin{aligned} \mathbb{C} &= ((1-\phi)^2 + k) \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}[\boldsymbol{\sigma}_+(\boldsymbol{\varepsilon})] + \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}}[\boldsymbol{\sigma}_-(\boldsymbol{\varepsilon})] \\ &= ((1-\phi)^2 + k) \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_+}[\boldsymbol{\sigma}_+(\boldsymbol{\varepsilon}_+)] \mathbb{P}^+ + \partial_{\boldsymbol{\varepsilon}_-}[\boldsymbol{\sigma}_-(\boldsymbol{\varepsilon}_-)] \mathbb{P}^- \\ &= ((1-\phi)^2 + k) 2\mu \mathbb{P}^+ + 2\mu \mathbb{P}^- \end{aligned} \quad (2.46)$$

此外，我们还提供了计算弹性张量、应力和应变能的 Matlab 代码，如图 2.21 所示。为了方便编程，前面提到的张量均使用 Voigt 标记。

## 参考文献

- [1] Lee S, Wheeler MF, Wick T. Pressure and fluid-driven fracture propagation in porous media using an adaptive finite element phase field model[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 305: 111-132.
- [2] Heister T, Wheeler MF, Wick T. A primal-dual active set method and predictor-corrector mesh adaptivity for computing fracture propagation using a phase-field approach[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 290: 466-495.
- [3] Zhang F, Huang W, Li X, Zhang S. Moving mesh finite element simulation for phase-field modeling of brittle fracture and convergence of Newton's iteration[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 356: 127-149.
- [4] Patil RU, Mishra BK, Singh IV. An adaptive multiscale phase field method for brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 329: 254-288.
- [5] Gerasimov T, De Lorenzis L. A line search assisted monolithic approach for phase-field computing of brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 312: 276-303.
- [6] Wheeler MF, Wick T, Wollner W. An augmented-Lagrangian method for the phase-field approach for pressurized fractures[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2014, 271: 69-85.
- [7] Wick T. Modified Newton methods for solving fully monolithic phase-field quasi-static brittle fracture propagation[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, 325: 577-611.
- [8] Zhang HW, Wu JK, Lv J. A new multiscale computational method for elasto-plastic analysis of heterogeneous materials[J]. *Computational Mechanics*, 2012, 49: 149-169.
- [9] Miehe C, Hofacker M, Welschinger F. A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2010, 199: 2765-2778.
- [10] Badnava H, Msekh MA, Etemadi E, Rabczuk T. An h-adaptive thermo-mechanical phase field model for fracture[J]. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2018, 138: 31-47.
- [11] Huang W, Ren Y, Russell RD. Moving Mesh Methods Based on Moving Mesh Partial Differential Equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 1994, 113: 279-290.
- [12] Shen J, Yang X. An efficient moving mesh spectral method for the phase-field model of two-phase flows[J]. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228: 2978-2992.
- [13] Li X, Yang JZ, E W. A multiscale coupling method for the modeling of dynamics of solids with application to brittle cracks[J]. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229: 3970-3987.
- [14] Borden MJ, Verhoosel CV, Scott MA, Hughes TJR, Landis CM. A phase-field description of dynamic brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, 217-220: 77-95.

- [15] Francfort GA, Marigo JJ. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46: 1319-1342.
- [16] Tanné E, Li T, Bourdin B, Marigo J-J, Maurini C. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 110: 80-99.
- [17] Miehe C, Welschinger F, Hofacker M. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010, 83: 1273-1311.
- [18] Amor H, Marigo J-J, Maurini C. Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: Numerical experiments[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2009, 57: 1209-1229.
- [19] Miehe C, Hofacker M, Welschinger F. A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering fracture mechanics*, 2010, 199: 2765-2778.
- [20] Li T, Marigo JJ, Guilbaud D, Potapov S. Gradient damage modeling of brittle fracture in an explicit dynamics context[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2016, 108: 1381-1405.
- [21] Wu J-Y, Nguyen VP, Nguyen CT, Sutula D, Bordas S, Sinaie S. Phase field modeling of fracture[J]. *Advances in Applied Mechancis: Multi-scale Theory Computational Mechanics*, 2018, 52.
- [22] Shen Y, Mollaali M, Li Y, Ma W, Jiang J. Implementation details for the phase field approaches to fracture[J]. *Journal of Shanghai Jiaotong University*, 2018, 23: 166-174.
- [23] Liu G, Li Q, Msekh MA, Zuo Z. Abaqus implementation of monolithic and staggered schemes for quasi-static and dynamic fracture phase-field model[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 121: 35-47.
- [24] Miehe C, Lambrecht M. Algorithms for computation of stresses and elasticity moduli in terms of Seth–Hill's family of generalized strain tensors[J]. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 2001, 17: 337-353.
- [25] Miranda I, Ferencz RM, Hughes TJR. An improved implicit-explicit time integration method for structural dynamics[J]. *Earthquake Engineering & Structural Dynamics*, 1989, 18: 643-653.
- [26] Ambati M, Gerasimov T, De Lorenzis L. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation[J]. *Computational Mechanics*, 2015, 55: 383-405.
- [27] Kalthoff JF. Modes of dynamic shear failure in solids[J]. *International Journal of Fracture*, 2000, 101: 1-31.
- [28] Chu D, Li X, Liu Z. Study the dynamic crack path in brittle material under thermal shock loading by phase field modeling[J]. *International Journal of Fracture*, 2017, 208: 115-130.



## 第3章 动态裂纹分岔与极限速度起源

### 3.1 引言

快速移动的裂纹分岔是一个引人注目的研究课题。尽管几十年来关于脆性材料的动态断裂已经进行了大量的实验和数值模拟研究，但是理解裂纹的动力学机制在固体物理和材料科学领域仍然是一个持续的挑战<sup>[1-9]</sup>。目前，描述脆性断裂最完备体系的就是基于连续介质理论的经典线性弹性断裂力学 (LEFM)，该理论预测：当流入裂纹尖端的能量达到材料断裂所需的能量  $G_c$  后，裂纹随即开始萌生<sup>[3,10]</sup>。而裂纹一旦开始，其运动就受到动态能量平衡的支配。LEFM 可以很好地预测低速断裂的裂纹运动<sup>[11]</sup>，但是，由于微分支和裂纹分叉（分支）等不稳定性，该理论在高速情况下被认为是错误的。

目前，动态脆性断裂中令人满意的裂纹分叉准则仍然缺失。一些理论研究建议将临界应力强度因子 (SIF)，裂纹速度或能量释放率 (ERR) 作为分支准则<sup>[6,12,13]</sup>，然而最近的仿真结果表明，能量准则似乎更具有普适性<sup>[14,15]</sup>。除了裂纹分叉不稳定性外，另一个长期存在的问题是极限裂纹扩展速度的起源<sup>[5,13,15,16]</sup>。基于能量平衡理论，单个直裂纹的运动方程可以被导出如下<sup>[11]</sup>

$$V_C(l) = V_R \left( 1 - \frac{G_C}{\Gamma(l)} \right) \quad (3.1)$$

其中， $\Gamma(l)$  为进入裂纹尖端的能量通量， $l$  为裂纹尖端位置， $V_C(l)$  和  $V_R$  分别是裂纹的传播速度以及材料的瑞利波速。理论上来说， $\Gamma(l)$  可以任意大，因此，方程 3.1 预测单个裂纹可以逐渐达到其理论极限速度， $V_R$ 。然而，实验结果表明裂纹的速度极少能达到这一理论极限<sup>[7,15]</sup>。比如，实验中所测得的 PMMA 的极限传播速度约为  $0.6 \sim 0.7 V_R$ <sup>[17,18]</sup>。以往对脆性断裂的实验研究认为裂纹路径的动态不稳定性，如微分支和裂纹分叉，可以解释极限速度的起源<sup>[7,17]</sup>。不过，由于  $\Gamma(l)$  通常无法实验测得（数值模拟可以）<sup>[4,7,13,17,19]</sup>，因此，理论预测与实验结果的差异并不意味着 LEFM 对脆性断裂的失效。

本章致力于通过相场模拟来揭示脆性断裂的分支准则，阐明极限裂纹速度的来源。注意到，近年来的许多模拟将连续法中的相场模型应用于动态断裂问题的研究。该方法来源于相变机制和经典的 Griffith 理论<sup>[20-26]</sup>，其中后者被用于当前的模拟中<sup>[23,27]</sup>。相场的思想以及理论推导已经在上一章节给出。此外，流入裂纹尖端的能量通量  $\Gamma(l)$  的大小由基于单位面积的归一化能量耗散  $\Gamma/G_c$  来评估。我们的模拟结果表明：当  $\Gamma(l)$  超过一个临界值 ( $\Gamma/G_c \approx 2.72 \pm 0.06$ )，裂纹分叉立即被触发。根据这一准则，线性弹性断裂的连续介质理论成功解释了长期存在的极

限裂纹扩展速度问题。在不引入任何特定准则和先验假设的情况下，相场模型较好地再现了实验中获得的裂纹扩展的关键特征，如裂纹路径的选择和极限裂纹速度等。此外，本章还报道了一些未被实验观察到的特征，如低速裂纹的能量过冲和分叉后的速度衰减。

## 3.2 理论模型

### 3.2.1 相场模型

本章所涉及的脆性断裂的模拟仍然采用源于经典 Griffith 理论的变分相场模型<sup>[23, 28, 29]</sup>，控制方程以及数值算法与第二章所给出的完全一致，我们在此不再赘述。

### 3.2.2 裂纹扩展速度

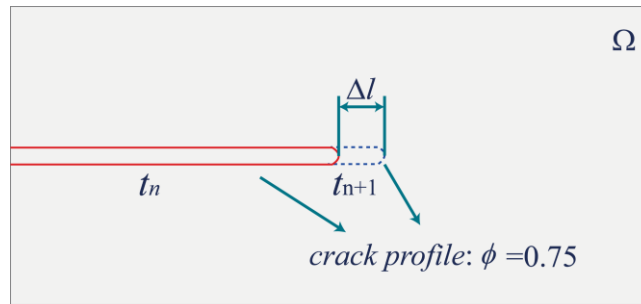


图 3.1 裂纹扩展速度计算示意图。

连续介质理论预测均匀材料拉伸断裂中单个裂纹的极限传播速度为其瑞利波速， $V_R^{[11]}$ 。然而，许多实验表明，拉伸裂纹的实际极限传播速度远远低于这个值<sup>[2, 6, 30, 31]</sup>。为了解决这一问题，必须精确地测量裂纹速度。在相场模拟中，我们采用有限元法（FEM）对整个计算域进行离散化。因此，裂纹尖端的位置无法明确给出。通过对离散的相场值进行二维插值，我们得到相场的等值线图。参考以往的文献<sup>[27]</sup>，我们以相场值为 0.75 的等值线作为裂纹轮廓<sup>1</sup>，如图 3.1 所示。假设裂纹尖端的推进距离为  $\Delta l$  在一个时间步长  $[t_n, t_{n+1}]$ ，裂纹的传播速度可以定义为：

$$V_{crack} = \frac{\Delta l}{t_{n+1} - t_n} \quad (3.2)$$

<sup>1</sup> 注意，所选相位场等值线值 0.75 并不是唯一的选择，在我们的模拟中测试了几个不同的数值，相应的裂纹速度分布基本一致。唯一的差异是，采用  $\phi = 0.75$  所计算的裂纹速度分布有相对较小的波动。

### 3.2.3 裂纹尖端的能量通量

一般来说, 流入裂纹尖端的能量主要消耗在产生新的裂纹表面, 很少一部分以热产生和声发射的形式耗散<sup>[7, 32, 33]</sup>。对于 PMMA 等脆性材料的断裂, 产生新的裂纹面被认为是耗能的唯一途径。通常, 在实验中测量裂纹尖端的能量流入是很困难的<sup>[1]</sup>, 但对于模拟来说很简单。在相场框架中, 总耗散能量可以计算如下

$$E_d = G_c \int_{\Omega} \frac{1}{2l_0} (\phi + l_0^2 \nabla \phi \cdot \nabla \phi) d\Omega \quad (3.3)$$

记录各时间步长的裂纹尖端位置, 用  $l(t)$  表示。因此, 单位面积的能量耗散可以定义为:  $\Gamma = \frac{dE_d}{dl}$ 。因此, 流入裂尖的能量通量可以通过  $\Gamma/G_c$  来评估。注意, 公式 3.3 的格式依赖于所使用的相场模型, 我们的模拟结果表明, 目前的格式可以令人满意地再现裂纹速度演变。

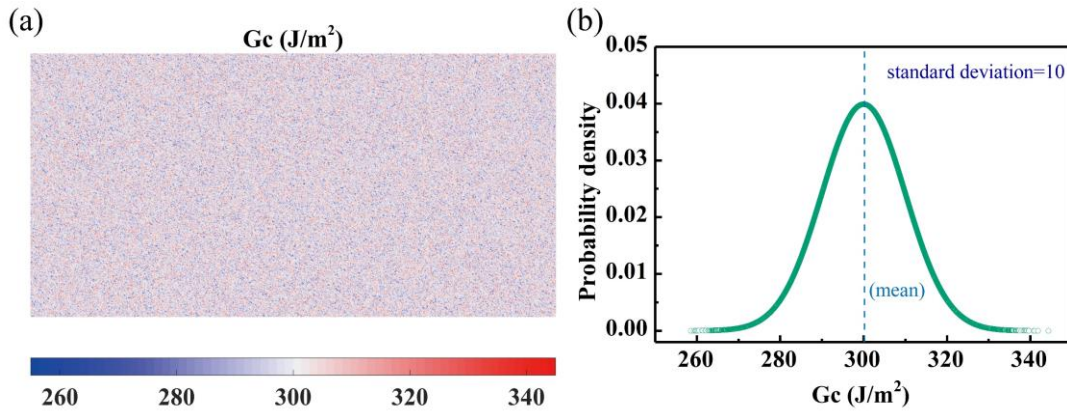


图 3.2 断裂能的高斯分布彩色云图 (a) 和概率密度分布曲线 (b)。

### 3.3 材料参数

我们的模拟使用了一种脆性的非晶材料 PMMA, 其动态断裂性质已被广泛研究<sup>[2, 7, 11, 17, 18]</sup>。参考以前的研究<sup>[14, 15]</sup>, PMMA 的密度为  $\rho = 1180 \text{ kg/m}^3$ , 杨氏模量  $E = 3.09 \text{ GPa}$ , 泊松比  $\nu = 0.35$ , 以及瑞利波速  $V_R = 906 \text{ m/s}$ 。考虑到真实材料的局部随机性, 断裂能  $G_c$  服从均值为  $300 \text{ J/m}^2$ , 方差 (std) 为 10 的高斯分布, 从而确保结果的鲁棒性<sup>[14, 15]</sup>。值得一提的是, 我们在  $\text{std} < 10\% G_c$  的条件下进行了一些测试。其结果表明, 裂纹路径会有所不同, 但裂纹分叉的能量判据不变。因此, 我们选择了一个相对较小的  $\text{std}=10$  (大约  $3.3\% G_c$ )。图 3.2 展示了  $G_c$  的概率密度分布图。考虑到标准差很小, 这一操作对我们的结论不会有显著的影响。在相场模型中, 特征长度  $l_0$  被引入以量化裂纹尖端耗散区大小, 其值由下式

确定

$$\sigma_c = \frac{3\sqrt{3}}{16} \sqrt{\frac{EG_c}{l_0}} \quad (3.4)$$

对于 PMMA 来说，这个值大约为 0.05mm。

## 3.4 结果与讨论

### 3.4.1 预应变 PMMA 动态断裂

我们考虑了一个预应变的 PMMA 矩形薄板，它源于先前的实验配置，并通过计算机模拟被广泛的研究<sup>[7, 34, 35]</sup>。图 3.3(a)给出了预应变的 PMMA 的几何形状和边界条件。样品的上下两侧承受固定为  $\pm\Delta U$  的位移载荷。我们首先进行一个准静态的计算，直到达到指定的预应变状态。因此，系统的总能量保持不变。在保持预应变状态不变的情况下，在板的左边缘中部创建一个尖锐的裂纹，然后立即进行动态计算，捕捉裂纹的动态扩展。

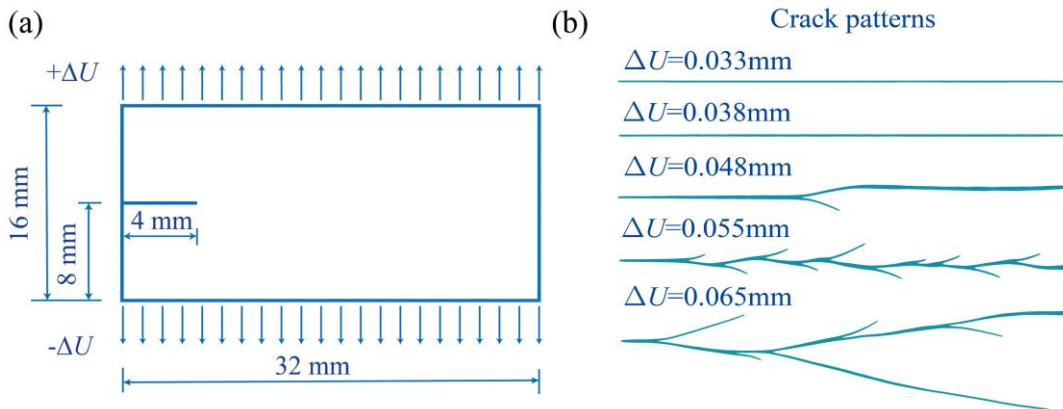


图 3.3 预应变 PMMA 矩形板的动态裂纹扩展；(a)当前模拟中使用的几何和边界条件的示意图。(b)相场模拟中在不同载荷下的裂纹轮廓。

在图 3.3(b)中，我们给出了在不同预应变载荷下的裂纹轮廓 ( $\phi = 0.75$ )。对于较低的预应变载荷，比如  $\Delta U = 0.033$  mm 和  $\Delta U = 0.038$  mm，可以观测到简单的直裂纹。两条直裂纹之间的区别是：较大预应变的裂纹损伤带略有扩大，这已经在之前的数值模拟中报道过<sup>[27, 36]</sup>。这种现象被认为与实验中的“mirror-mist-hackle”转变有关<sup>[9, 37]</sup>。对于较高的载荷  $\Delta U = 0.048$  mm，随着裂纹的传播，直裂纹首先逐渐变宽，在裂纹尖端达到  $x_b \approx 0.454 l$  时直裂纹分裂为两个非对称的枝裂纹。之后，小的裂纹分枝逐渐消失，而大的裂纹不断扩大。进一步增加载荷到  $\Delta U = 0.055$  mm，首次裂纹分叉提前至  $x_b \approx 0.237 l$ 。然后，裂纹“选择”一条上下交替分支的路径，这符合稳定性分析，与实验结果也非常相似<sup>[16]</sup>，如图 3.4 所



示。而对于最高的载荷  $\Delta U = 0.065 \text{ mm}$ ，裂纹模式表现为复杂的多分枝，随后我们将进行详细的讨论。

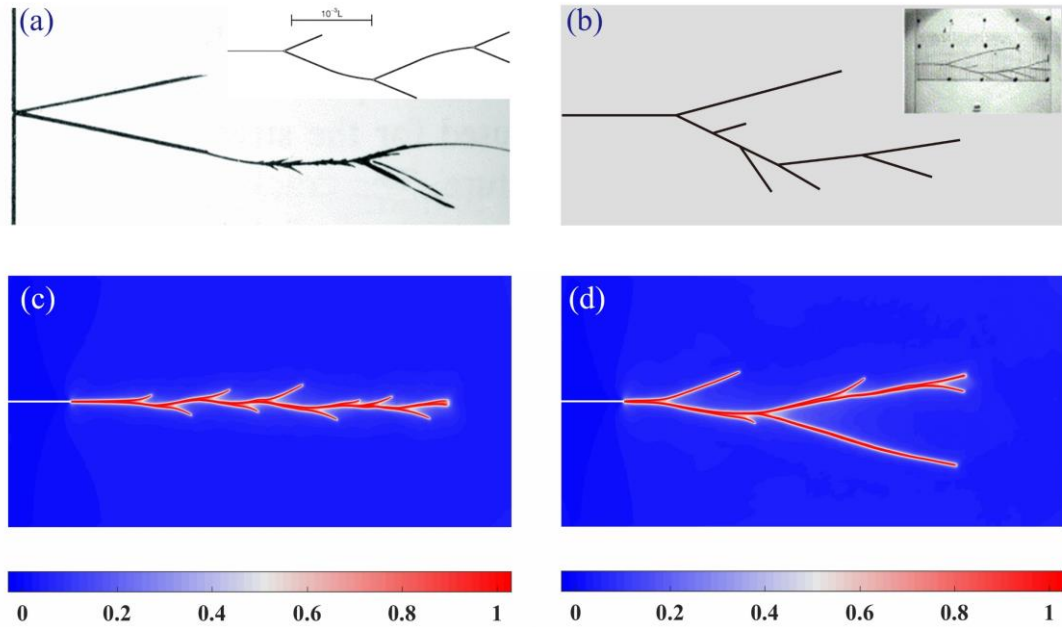


图 3.4 实验观测 (a, b) [16]与模拟的 (c, d) 上下交替的动态裂纹分叉对比。

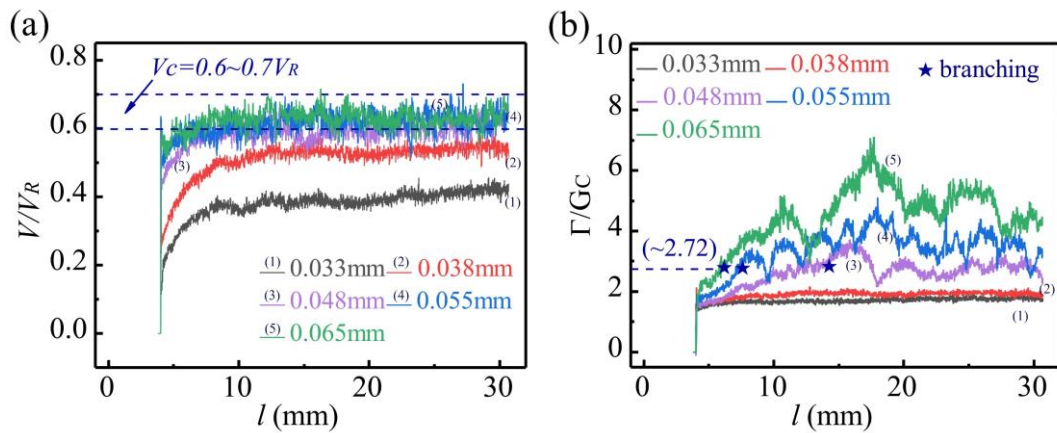


图 3.5 动态断裂的裂纹扩展速度和能量耗散；(a)不同载荷下的归一化裂纹扩展速度曲线  $V/V_R$ ；(b) 裂纹尖端的单位面积归一化能量耗散  $\Gamma/G_C$  的演化。

通过跟踪每个时间步的裂纹扩展过程，计算出的裂纹扩展速度如图 3.5(a)所示。显然，裂纹总是先加速，直到达到稳定的传播速度， $V_s$ 。随着载荷的增加，加速过程变得更加明显，相应的  $V_s$  也明显增大。我们的模拟中观测到一个非常有趣的现象，即裂纹分叉的极限速度大约是  $V_C = 0.6 \sim 0.7V_R$ ，这跟实验的结果非常的一致<sup>[6]</sup>。通过基于 Griffith 理论阈值的校准<sup>[38]</sup>，单位面积的归一化能量耗散  $\Gamma/G_C$  的演化在图 3.5(b)中给出。当  $\Gamma/G_C$  略微超过 1 的时候，裂纹开始萌生，这

遵循 Griffith 准则。随后，一个能量过冲现象被观察到，其随着载荷的增加逐渐湮灭。我们的结果表明，裂纹的第一个分叉事件（图 3.5(b)中的一个星形标记）总是对应于  $\Gamma/G_c \approx 2.72 \pm 0.06$ ，这意味着裂纹的分叉存在一个能量准则。值得注意的是，该值明显大于 2，这可能与裂纹分叉前实验中观察到的损伤带增厚有关。

图 3.6 给出了最大载荷  $\Delta U = 0.065 \text{ mm}$  下裂纹形貌、速度和归一化的能量耗散率的对比图，以支持我们对裂纹分叉现象做一个综合的分析。这里，我们主要考虑前三次裂纹分叉事件。在第一次裂纹分叉前，裂纹以极高的加速度加速到一个极限速度  $V_{limit}$ （见图 3.6）。当流入裂纹尖端的能量达到一个临界值，对应  $\Gamma/G_c \approx 2.72$ ，第一次裂纹分叉发生。随后，两个非对称的分枝裂纹竞争性的生长。随着能量通量的进一步增加到  $\Gamma/G_c \approx 4.23$ ，较大的裂纹分枝再次分裂为两个裂纹。由于第一次分叉之后小的裂纹分枝并未完全消失，此时有三条裂纹同时传播。回顾图 3.3(b)，在  $\Delta U = 0.033 \text{ mm}$  时，单裂纹稳定传播的  $\Gamma/G_c$  大约为 1.5。假设那条小分枝裂纹的  $\Gamma/G_c$  接近这个值（1.5），那么第二次分叉的  $\Gamma/G_c$  大约为 2.73。由于裂纹增长的竞争性，小裂纹最终消失，导致较大的能量通量注入到单个裂纹中。第三次分叉事件发生在  $\Gamma/G_c \approx 2.78$ ，这与前两次分叉非常接近。结合分叉裂纹在不同载荷作用下的演化，一个能量通量相关值  $\Gamma/G_c \approx 2.72 \pm 0.6$  被认为是裂纹分叉的临界值。这可以通过这样一个事实来解释，即当注入裂纹尖端的能量不能通过单个裂纹耗散时，裂纹将立即分裂。

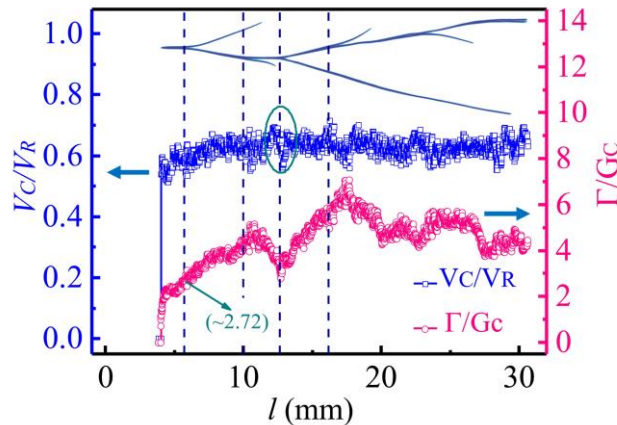


图 3.6 最大荷载作用下归一化断裂速度、断裂形态和单位面积能耗散的比较。

### 3.4.2 非均质材料中的裂纹扩展

如本章引言所述，实验报道了裂纹速度存在一个低于理论极限的临界值，如 PMMA 为  $0.6 \sim 0.7 V_R$ ，钠钙玻璃为  $0.5 \sim 0.65 V_R$ 。那么为什么裂纹速度无法达到  $V_R$  呢？这与上述裂纹分叉的能量判据是否有关？为了回答这些问题，我们精心设计了两组裂纹在“强-中-弱”和“弱-中-强”材料中的传播的模拟，如图 3.7 所示。对于

“强-中-弱”(S-M-W)材料, 将整个矩形求解区域均匀分为三部分, 平均断裂能分别为  $300 \text{ J/m}^2$ 、 $200 \text{ J/m}^2$ 、 $100 \text{ J/m}^2$ 。图 3.7(a)展示了 S-M-W 材料在载荷  $\Delta U = 0.033 \text{ mm}$  时的裂纹花样, 与之对应的归一化断裂速度和能量耗散如图 3.7(c) 所示。在裂纹萌生阶段,  $\Gamma/G_c$  迅速增加到一个相对较大的值( $\approx 1.65$ ), 这明显高于之后的稳态裂纹扩展( $1.35 \sim 1.5$ )。我们把这种现象称为能量过冲, 这可能是由静态断裂向动态断裂过渡的结果。虽然裂纹速度也有瞬时过冲, 但由于时间分辨率的限制<sup>[5]</sup>, 在实验中很难观察到。从“强(I)”区域到“中(II)”区域,  $\Gamma/G_c$  上升到一个更高的平台, 表明裂纹尖端的等效能量通量增加。相应的, 裂纹以明显的加速和加厚作为回应。当裂纹进入“弱(III)”区域时,  $\Gamma/G_c$  急速增加到约 4.6, 明显大于 2.72 的临界值。因此, 单个裂纹分裂成两个不对称的分支。不同于  $\Gamma/G_c$  的演化, 进入 III 区后, 断裂速度立即加速到约  $0.8 V_R$ , 然后迅速下降, 最终在  $0.6 \sim 0.7 V_R$  (实验测量的极限速度) 范围内波动。

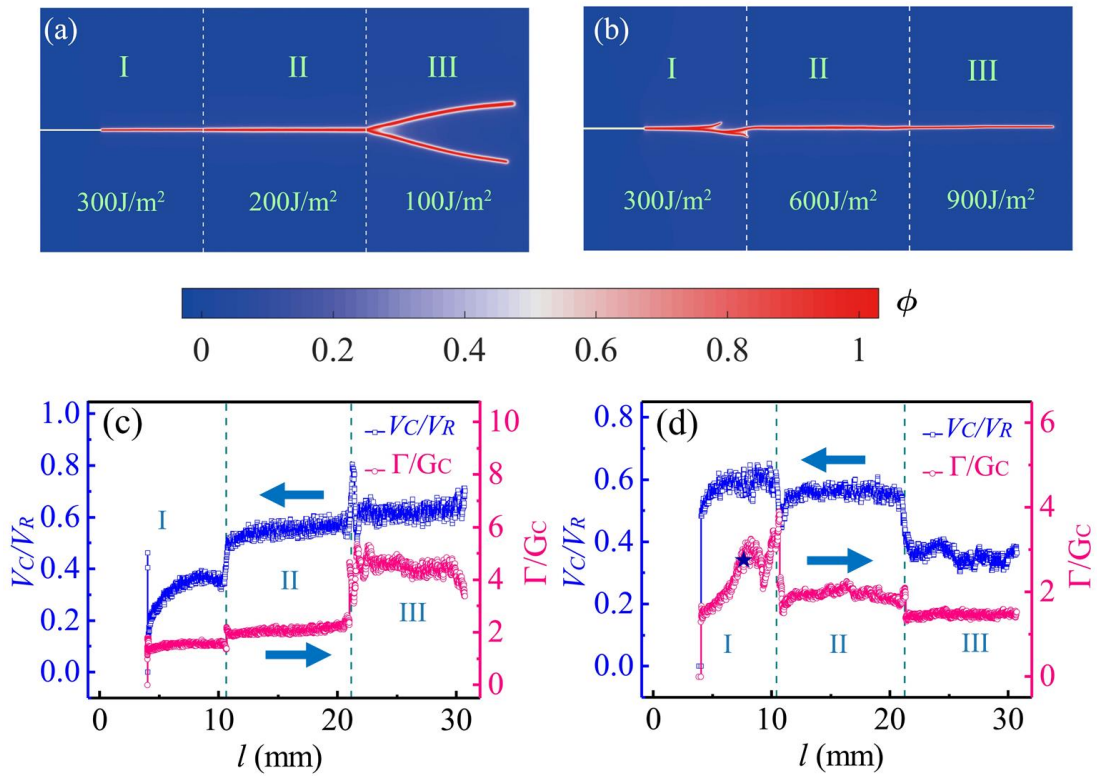


图 3.7 S-M-W 和 W-M-S 材料的模拟结果。S-M-W 在加载  $\Delta U = 0.033 \text{ mm}$  时(a) 以及 W-M-S 材料在加载  $\Delta U = 0.055 \text{ mm}$  时(b)的裂纹形态。相应的  $V/V_R$  和  $\Gamma/G_c$  的演化对于 S-M-W (c) 和 W-M-S 材料(d)。

图 3.7(b)展示了在载荷为  $\Delta U = 0.055 \text{ mm}$  时平均断裂能分别为  $300 \text{ J/m}^2$ 、 $600 \text{ J/m}^2$  和  $900 \text{ J/m}^2$  的“弱-中-强”(W-M-S)材料中的裂纹扩展。与图 3.7 (a)不同

的是,在高载荷下裂纹萌生时,没有观察到能量过冲现象。在“弱(I)”区域,当 $\Gamma/G_C$ 增加到约 2.73 时,裂纹分叉产生,且完全遵循前面给出的能量准则。进入“中(II)”区域后, $\Gamma/G_C$ 的值发生突降,这表示流入裂纹尖端的等效能量通量的减小。由于 $\Gamma/G_C$ 在分岔阈值以下,分支裂纹消失,直线裂纹以低于 $V_C$ 的速度传播。而在“强(III)”区域, $\Gamma/G_C$ 的值进一步下降,这是导致裂纹变薄和速度下降的主要原因。图 3.3 和图 3.7 的对比表明,仅人为地改变材料的断裂能就可以将直裂纹转变为分支裂纹,反之亦然。事实上,这一操作等效于改变 $\Gamma(l)$ 。当 $\Gamma(l)$ 超过一个临界值,比如对于 PMMA,  $\Gamma(l) \geq 2.72G_C$ , 一条单裂纹分裂成两条。这一研究结果有力地支持了裂纹分叉的能量判据<sup>[15]</sup>。

回到前面提出的极限裂纹速度问题,图 3.7 非常直观地显示了裂纹速度是 $\Gamma/G_C$ 的强函数。基于裂纹扩展是能量耗散的唯一形式的假设,LEFM 也预测了裂纹的扩展速度。如果 $\Gamma(l)$ 可以任意大,方程 3.1 预测了单个裂纹可以达到其极限传播速度,即 $V_R$ 。然而,我们的模拟结果表明对于单裂纹来说 $\Gamma(l)$ 具有一个临界值,这意味着裂纹的极限速度无法达到 $V_R$ 。对于 PMMA 来说,当前的工作确定了一个临界值 $\Gamma(l)$ 约为 $2.72 G_C$ ,其相应的极限速度约为 $0.63 V_R$ ,与实验结果一致。

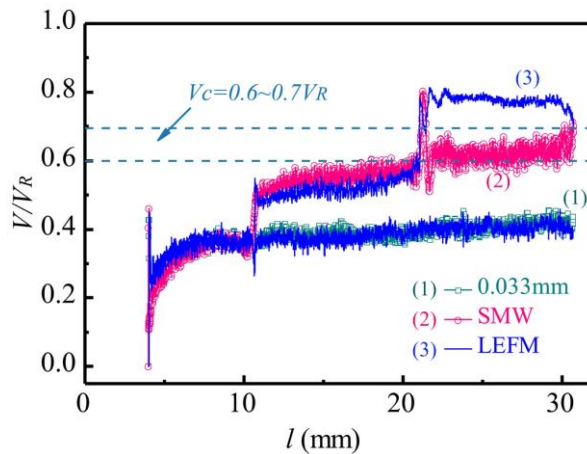


图 3.8 模拟结果与 LEFM 理论分析的比较。

为进一步验证公式 3.1 的正确性,由相场模拟和 LEFM 预测得到的断裂速度如图 3.8 所示。我们首先考虑一条单裂纹的传播在载荷 $\Delta U = 0.033 \text{ mm}$ 时。从图 3.8 中可以看出,LEFM 预测的裂纹速度与相场模拟结果吻合较好,甚至也出现了裂纹萌生时的速度过冲现象。对于模拟的 S-M-W 材料的分支裂纹,“I”和“II”区域的裂纹扩展速度与 LEFM 的预测结果也吻合较好。而在“III”区域,直接使用公式 3.1 预测的速度明显高于临界速度 $V_C = 0.6 \sim 0.7 V_R$ 。上述偏差的原因是可以理解的,即式 3.1 实际上只对单个裂纹的运动有效。尽管裂纹分叉后裂纹尖端的总能量通量较大,但对单个裂纹的分配值不超过裂纹分叉发生的阈值。分支的能

量准则对于单个裂纹总是有效的，不管它是“根”还是“子”裂纹。

### 3.4.3 弱界面中的裂纹传播

一个有趣的想法是，如果我们能阻止断裂分叉<sup>[39]</sup>，那么裂纹会加速到接近  $V_R$  的超高速。因此，我们进行了一个模拟，其中裂纹被限制在弱界面(窄带)传播。基于精心设计的“强-中-弱”(S-M-W)材料，我们进一步将“弱”材料区域(图 3.9(a)中的区域 III)划分为三部分。弱界面的宽度为  $2l_0$ ，其平均断裂能为  $100 \text{ J/m}^2$ 。在这个区域其余部分的平均断裂能是  $600 \text{ J/m}^2$ 。因此，应该出现在区域 III 的裂纹分叉被阻止。裂纹必须在窄带内生长(见图 3.9(a))，这导致其速度可以加快到非常高(接近  $V_R$ )。图 3.9(b) 将我们在模拟中获得的裂纹速度与 LEFM 预测的裂纹速度进行了比较，它们表现出空前的一致性。这一结果表明，如果可以抑制裂纹分叉，裂纹可以加速至接近  $V_R$  的高速，这完全符合 LEFM 理论。

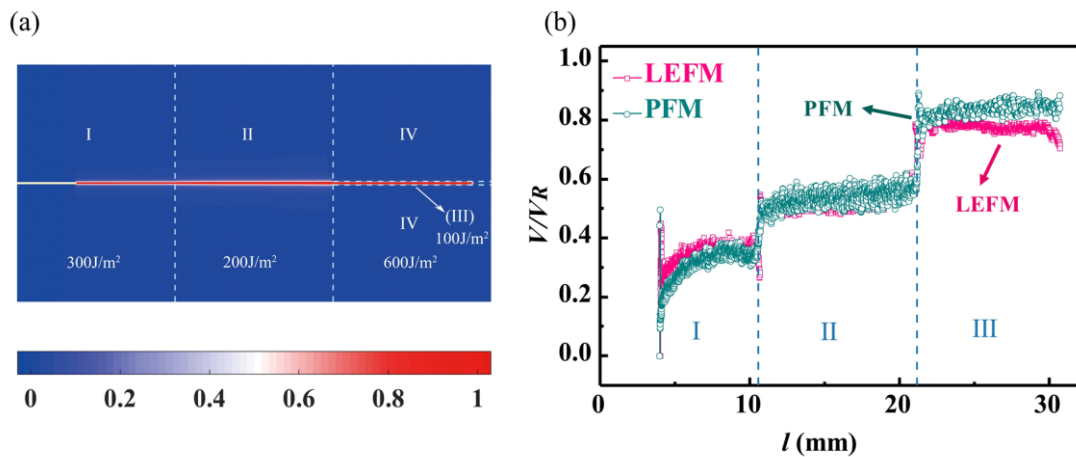


图 3.9 (a)包含弱界面的 S-M-W 材料中的裂纹模式。(b) 由相场模拟以及 LEFM 预测的裂纹速度( $V/V_R$ )随裂纹尖端位置的变化。

至此，我们从能量平衡的角度对裂纹的路径选择也有了一般性的认识。在较小的载荷条件下，进入裂纹尖端的能量通量  $\Gamma(l)$  仅足以驱动具有镜像断裂表面（相场中的薄损伤带）的单个直裂纹扩展。当  $\Gamma(l)$  增加但小于临界值时，裂纹的加速度降低，这在实验和仿真中均得到了验证，并且也可以通过公式 3.1 反映出来 ( $\dot{V}(l) \propto 1/\Gamma(l)^2$ )。为了吸收额外的能量，裂纹的扩展伴随着速度的适度提升和断裂面的明显粗糙度(表现为较厚的损伤带)。随着  $\Gamma(l)$  进一步提高到临界值（分叉的能量标准被认为是通用的，但是对于不同的材料其具体的值是变化的，例如钠钙玻璃  $\Gamma(l) \approx 2.5G_C$ ，在附录中给出），裂纹分叉发生。分叉后的两个“子”裂纹不是以较低的裂纹速度对称地传播，而是趋于相互竞争生长。占优势的“子”裂纹

将吸收更多的能量并以更高的速度（接近  $V_C$ ）生长，这导致另一个“子”裂纹逐渐消逝。因此，占优势的“子”断裂发展成为新的“根”断裂。一旦满足能量标准，裂纹分叉事件将再次发生。

### 3.5 小结

总结来说，在没有任何人为假设的情况下，通过当前的相场模拟可以确定一个明显低于  $V_R$  的极限裂纹速度，这与实验结果是一致的。通过计算裂纹的耗散能量来评估进入裂纹尖端的能量通量。这使我们能够基于连续理论计算裂纹速度，其结果与相场模拟结果非常吻合。借助本章所揭示的裂纹分叉的能量准则，连续介质理论可以很好地预测实验中观察到的极限裂纹速度。结合我们的模拟和连续理论，可以合理地解释脆性断裂中裂纹的路径选择。然而，尽管能量准则与极限裂纹速度之间的相关性似乎对于诸如 PMMA 和钠钙玻璃之类的脆性材料而言是普遍的，但仍需要在各种各样的脆性材料中进行验证。裂纹分叉的不同临界值  $\Gamma/G_C$  可能与材料的不同的分子耗散机制有关。

### 3.6 附录 脆性钠钙玻璃的动态断裂

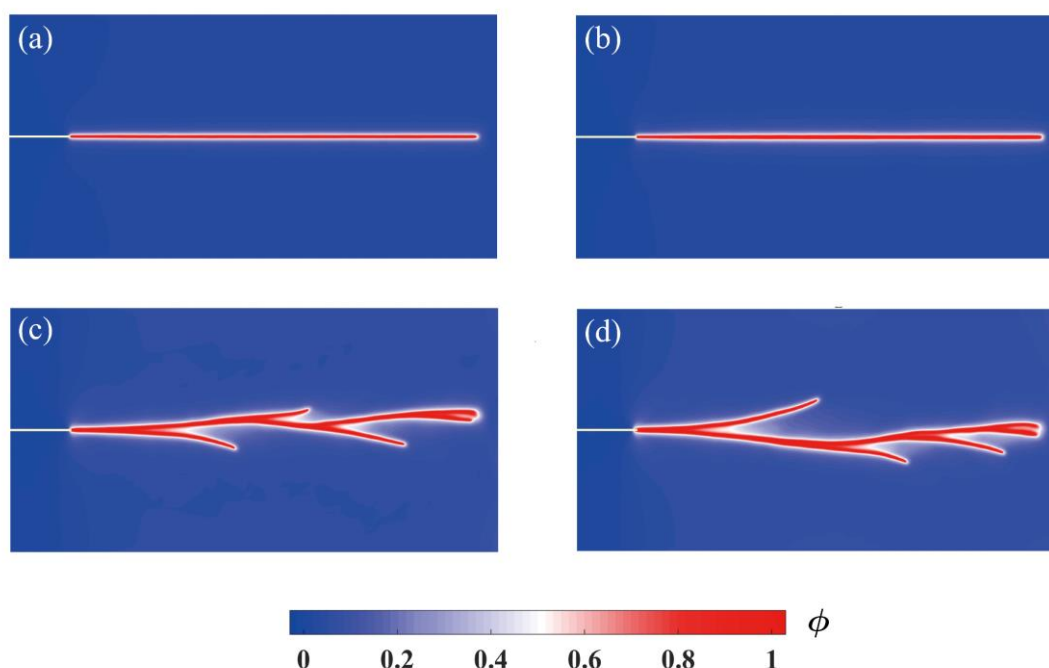


图 3.10 预应变的钠钙玻璃矩形板在不同载荷作用下的裂纹形态。

我们使用与预应变 PMMA 相同的构型来研究钠钙玻璃的动态断裂。基本的材料参数被设置为： $\rho = 1180 \text{ kg/m}^3$ ， $E = 72 \text{ GPa}$ ， $\nu = 0.22$ ， $\sigma_c = 30 \sim 35 \text{ MPa}$ ， $l_0 = 0.08 \text{ mm}$ ， $V_R = 3110 \text{ m/s}$ 。断裂能  $G_C$  仍然遵循一个均值为  $3.8 \text{ J/m}^2$ ，标准差

为 0.11 的高斯分布。图 3.10 为四种载荷作用下裂纹形态由直裂纹向多分支裂纹的演化过程。载荷分别为： $\Delta U = 0.008 \text{ mm}$ ， $\Delta U = 0.009 \text{ mm}$ ， $\Delta U = 0.012 \text{ mm}$  以及  $\Delta U = 0.014 \text{ mm}$ 。通过后处理得到归一化的裂纹扩展速度  $V/V_R$ ，如图 3.11(a) 所示。可以看出，钠钙玻璃的极限裂纹传播速度处于  $0.57 \sim 0.65 V_R$  范围内，这跟实验结果非常一致<sup>[6, 15]</sup>。图 3.11(b) 展示了不同载荷下的单位面积的归一化能量耗散  $\Gamma/G_c$  的演化过程。与 PMMA 相似，我们也发现钠钙玻璃中单裂纹的分叉事件 (由图 3.11(b) 中的一颗星标记) 总是与  $\Gamma/G_c \sim 2.5$  相关，这说明在脆性材料中裂纹分叉的能量判据是普遍存在的。因此，LEFM 预测一个极限裂纹速度约为  $0.6V_R$ ，非常接近于实验测量<sup>[6, 15]</sup>。

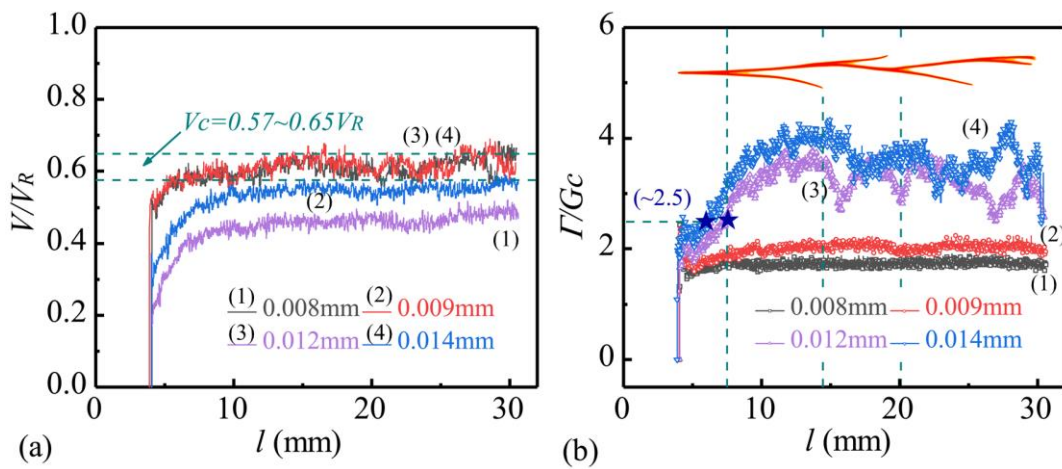


图 3.11 (a) 正则化的裂纹速度  $V/V_R$  在不同预应变条件下的演化曲线。(b) 裂纹尖端正则化的能量耗散速率  $\Gamma/G_c$  在不同预应变下的演化。

## 参考文献

- [1] Bouchbinder E, Goldman T, Fineberg J. The dynamics of rapid fracture: instabilities, nonlinearities and length scales[J]. Reports on Progress in Physics, 2014, 77: 046501.
- [2] Fineberg J, Gross SP, Marder M, Swinney HL. Instability in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 1991, 67: 457.
- [3] Freund LB. Dynamic fracture mechanics[M]. Cambridge University Press, 1998.
- [4] Gao H. A theory of local limiting speed in dynamic fracture[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1996, 44: 1453-1474.
- [5] Katzav E, Adda-Bedia M, Arias R. Theory of dynamic crack branching in brittle materials[J]. International Journal of Fracture, 2007, 143: 245-271.
- [6] Ravi-Chandar K. Dynamic fracture[M]. Elsevier, 2004.
- [7] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Energy dissipation in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 1996, 76: 2117.
- [8] Cox BN, Gao H, Gross D, Rittel D. Modern topics and challenges in dynamic fracture[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2005, 53: 565-596.
- [9] Rabinovitch A, Belizovsky G, Bahat D. Origin of mist and hackle patterns in brittle fracture[J]. Physical Review B, 2000, 61: 14968.
- [10] Griffith AA, Eng M. VI. The phenomena of rupture and flow in solids[J]. Phil Trans R Soc Lond A, 1921, 221: 163-198.
- [11] Sharon E, Fineberg J. Confirming the continuum theory of dynamic brittle fracture for fast cracks[J]. Nature, 1999, 397: 333.
- [12] Eshelby J. Energy relations and the energy-momentum tensor in continuum mechanics. Fundamental contributions to the continuum theory of evolving phase interfaces in solids[M]. Springer; 1999: 82-119.
- [13] Seelig T, Gross D. On the interaction and branching of fast running cracks-a numerical investigation[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1999, 47: 935-952.
- [14] Bleyer J, Molinari J-F. Microbranching instability in phase-field modelling of dynamic brittle fracture[J]. Applied Physics Letters, 2017, 110: 151903.
- [15] Bleyer J, Roux-Langlois C, Molinari J-F. Dynamic crack propagation with a variational phase-field model: limiting speed, crack branching and velocity-toughening mechanisms[J]. International Journal of Fracture, 2017, 204: 79-100.
- [16] Bouchbinder E, Mathiesen J, Procaccia I. Branching instabilities in rapid fracture: Dynamics and geometry[J]. Physical Review E, 2005, 71: 056118.
- [17] Sharon E, Fineberg J. Microbranching instability and the dynamic fracture of brittle materials[J]. Physical Review B, 1996, 54: 7128.
- [18] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Local crack branching as a mechanism for instability in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 1995, 74: 5096.



- [19] Abraham FF, Gao H. How fast can cracks propagate?[J]. *Physical Review Letters*, 2000, 84: 3113.
- [20] Karma A, Kessler DA, Levine H. Phase-field model of mode III dynamic fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 87: 045501.
- [21] Henry H, Levine H. Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 93: 105504.
- [22] Karma A, Lobkovsky AE. Unsteady Crack Motion and Branching in a Phase-Field Model of Brittle Fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 92: 245510.
- [23] Bourdin B, Francfort GA, Marigo J-J. The variational approach to fracture[J]. *Journal of Elasticity*, 2008, 91: 5-148.
- [24] Bourdin B, Marigo J-J, Maurini C, Sicsic P. Morphogenesis and propagation of complex cracks induced by thermal shocks[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 112: 014301.
- [25] Wu J-Y. A unified phase-field theory for the mechanics of damage and quasi-brittle failure[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, 103: 72-99.
- [26] Wu J-Y, Nguyen VP. A length scale insensitive phase-field damage model for brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 119: 20-42.
- [27] Borden MJ, Verhoosel CV, Scott MA, Hughes TJ, Landis CM. A phase-field description of dynamic brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, 217: 77-95.
- [28] Francfort GA, Marigo JJ. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46: 1319-1342.
- [29] Bourdin B, Francfort GA, Marigo JJ. Numerical experiments in revisited brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48: 797-826.
- [30] Ravi-Chandar K, Knauss W. An experimental investigation into dynamic fracture: III. On steady-state crack propagation and crack branching[J]. *International Journal of Fracture*, 1984, 26: 141-154.
- [31] Miller O, Freund L, Needleman A. Energy dissipation in dynamic fracture of brittle materials[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1999, 7: 573.
- [32] Massy D, Mazen F, Landru D, Mohamed NB, Tardif S, Reinhardt A, Madeira F, Kononchuk O, Rieutord F. Crack Front Interaction with Self-Emitted Acoustic Waves[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121: 195501.
- [33] Pla O, Guinea F, Louis E, Ghaisas S, Sander L. Viscous effects in brittle fracture[J]. *Physical Review B*, 1998, 57: R13981.
- [34] Wolff C, Richart N, Molinari JF. A non - local continuum damage approach to model dynamic crack branching[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2015, 101: 933-949.
- [35] Zhou F, Molinari J-F, Shioya T. A rate-dependent cohesive model for simulating dynamic crack propagation in brittle materials[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2005, 72: 1383-1410.
- [36] Bobaru F, Zhang G. Why do cracks branch? A peridynamic investigation of dynamic brittle fracture[J]. *International Journal of Fracture*, 2015, 196: 59-98.
- [37] Sundaram BM, Tippur HV. Dynamic fracture of soda-lime glass: a full-field optical investigation of

crack initiation, propagation and branching[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2018, 120: 132-153.

[38] Tanné E, Li T, Bourdin B, Marigo J-J, Maurini C. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 110: 80-99.

[39] Washabaugh PD, Knauss W. A reconciliation of dynamic crack velocity and Rayleigh wave speed in isotropic brittle solids[J]. *International Journal of Fracture*, 1994, 65: 97-114.

## 第 4 章 有限形变断裂相场的光滑有限元建模

### 4.1 引言

超弹性材料如橡胶、水凝胶等，因其具有良好的拉伸性和可逆性而被广泛应用于工业和学术研究中<sup>[1-4]</sup>。因此，预测此类材料的裂纹成核、生长以及破坏具有基础和工程应用的双重意义。早期的研究多采用不连续的方法来模拟裂纹的演化<sup>[5-9]</sup>。然而，对于通常经历复杂的变形的非线性弹性体来说，这仍然是一个棘手的任务。随着一类扩散裂纹模型的发展<sup>[10-12]</sup>，这一困境有望得到解决。与不连续裂纹建模相比，这类方法不需要对尖锐裂纹表面进行显式跟踪，便于处理复杂的裂纹分支和融合模式<sup>[13,14]</sup>。前面用于脆性断裂的相场法 (PFM) 作为这些方法中最突出的方法之一<sup>[15,16]</sup>，已经产生了广泛的研究，并在本章的研究中再次应用<sup>[17,18]</sup>。

注意到，先前与断裂的相场方法有关的研究大多是在有限元 (FEM) 体系下进行。尽管 FEM 已经是解决各种偏微分方程 (PDE) 问题的最受欢迎方法之一，但其关键思想早在上世纪中叶已经出现<sup>[38,39]</sup>。一些固有的缺陷导致标准的 FEM 在大变形情况下并不是最佳选择。基于这些原因，Liu 等人<sup>[19-22]</sup>开发了一类光滑有限元方法 (S-FEM)，它是标准有限元法和一些无网格技术的结合。S-FEM 的核心是应变平滑技术，其源于 Chen 等人<sup>[23]</sup>提出的稳定节点积分 (SCNI) 概念。目前，S-FEM 已经发展成为一个大家庭。按光滑域的构造分类，主要包括 cell-based S-FEM (CS-FEM)<sup>[22]</sup>，node-based S-FEM (NS-FEM)<sup>[24]</sup>，edge-based S-FEM (ES-FEM)<sup>[25]</sup>，以及 face-based S-FEM (FS-FEM)<sup>[26]</sup>。这些不同类型的 S-FEM 已被证明拥有各自独特的性能。一般情况下，S-FEM 得到的刚度矩阵比 FEM 得到的刚度矩阵更软，从而减弱了有限元法对刚度的高估并提高了计算精度和收敛速度<sup>[20]</sup>。由于在 S-FEM 中没有进行映射操作，因此不存在对网格畸变敏感的雅可比矩阵。因此，S-FEM 在处理网格变形和极端变形时具有更强的鲁棒性<sup>[19,27,28]</sup>。此外，S-FEM 可以直接建立在现有的有限元网格上，而不需要增加额外的自由度。S-FEM 以其独特的性质广泛应用于固体力学的各个方面，特别是大变形方面<sup>[27-32]</sup>。最近的报道对基于 CS-FEM 的断裂相场模型进行了重新构造，但仍局限于小变形<sup>[33]</sup>。

除了上述优点外，S-FEM 的主要不足在于其刚度矩阵的带宽比 FEM 大，因此需要较高的计算成本<sup>[20]</sup>。相场方法也需要非常精细的网格来精确识别裂纹路径<sup>[13,34,35]</sup>。可以想象，PFM 和 S-FEM 的结合将会是计算资源的巨大挑战。实际上，为了满足 PFM 对网格的苛刻要求，研究者们开发了多种复杂的自适应网格

方案，如混合自适应网格和多尺度网格<sup>[36,37]</sup>。然而，现有的大部分算法都是在有限元框架下设计的<sup>[34,35,38]</sup>。为了能够在 S-FEM 框架下有效地进行大变形断裂的相场建模，开发 S-FEM 与 PFM 耦合的自适应网格方案至关重要。

在本章节，我们提出了在 ES-FEM 框架下建立大变形断裂的相场方法，ES-FEM 是最受欢迎的 S-FEM 之一<sup>[25]</sup>。由于 ES-FEM 具有很高的精度和对网格变形的不敏感性，因此在大变形方面，相场方法在处理复杂裂纹方面的优势得以充分释放。鉴于 PFM 和 ES-FEM 的计算成本较高，因此我们进一步基于 *ha*-PFM 提出一个改进的多级自适应网格方案。与有限元框架下的自适应网格不同，自适应的 ES-FEM 需要在网格每次更新后识别边缘及其支撑单元的连接性。尽管该策略增加了约 1%~2% 的额外计算开销，但它不仅提高了精度，而且将计算效率提高了约 20 倍。此外，我们通过四个来自于实验的典型算例来证实该方法的有效性。本文其余部分组织如下。4.2 节介绍了有限形变基本理论以及常用于描述橡胶等材料的超弹性模型。在此基础上，推导了大变形条件下断裂相场模型的控制方程。4.3 节概述 ES-FEM 的理论方面，包括关键的应变平滑技术和一种新的自适应网格算法。详细的数值实现涉及离散化和线性化的弱形式在 4.4 节给出。4.5 节展示了几个验证示例。最后，4.6 节对本文进行了总结并得出了一些结论。

## 4.2 有限形变下断裂相场格式

在本节中，我们在有限形变的框架下对 Griffith-type 相场模型进行了构造。

### 4.2.1 有限形变理论简介

在有限形变（大变形）情况中，初始构型和当前构型需要明确区分。我们考虑具有初始(未变形)构型  $\Omega_0$  的任意弹性体，其中物质点  $P_i$  的位置矢量表示为  $\mathbf{X}$ 。在变形过程中，通过初始构型在当前构型  $\Omega$  中的映射  $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$  来识别  $\mathbf{X}$  的运动。从而，基本变形梯度张量可以表示为

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}} \chi(\mathbf{X}, t) = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \quad (4.1)$$

其中， $\mathbf{I}$  是二阶单位张量， $\mathbf{u}$  表示位移场。 $\mathbf{F}$  的行列式，即雅可比行列式  $J = \det(\mathbf{F}) > 0$  在初始配置 ( $\Omega_0$ ) 和当前配置 ( $\Omega$ ) 之间建立一个积分映射，表示为

$$d\Omega = Jd\Omega_0 \quad (4.2)$$

在非线性连续介质力学的理论框架中，一个重要的变形量是格林-拉格朗日应变张量，其定义为

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (4.3)$$

这里， $\mathbf{C}$  是用物质坐标表示的柯西格林张量，其表示为

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T + \mathbf{I} \quad (4.4)$$

这种变形测量在本构方程中得到了广泛的应用，如下一小节介绍的超弹性 Neo-Hookean 模型。

### 4.2.2 超弹性模型

目前，大量的研究者已经开发出了丰富的超弹性的本构模型，并且已经很好的模拟了橡胶，水凝胶等材料的力学响应<sup>[39,40]</sup>。本章考虑一类由 Neo-Hookean 模型描述的各向同性弹性体。在不考虑损伤的情况下，自由能密度表示为：

$$\psi_0(\mathbf{F}) = \frac{\mu}{2} [\text{tr}[\mathbf{F}^T \mathbf{F}] - 3] + \frac{\mu}{\beta} [(J^{-\beta} - 1)] \quad (4.5)$$

其中  $\beta = 2\nu / (1-\nu)$ <sup>[41]</sup>， $\mu$  是剪切模量， $\nu$  表示泊松比。于是，我们可以得到如下的第一 Piola-Kirchhoff (PK1) 应力张量

$$\mathbf{P}_0 = \partial_{\mathbf{F}} \psi_0(\mathbf{F}) = \mu[\mathbf{F} - J^{-\beta} \mathbf{F}^{-T}] \quad (4.6)$$

以及第二 Piola-Kirchhoff (PK2) 应力张量

$$\mathbf{S}_0 = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P}_0 = \mu(\mathbf{I} - J^{-\beta} \mathbf{C}^{-1}) \quad (4.7)$$

为了方便程序中的 Voight 标记，基于公式 4.7 推导（一些重要公式在附录给出）的切线模量给出为

$$\mathbb{C}^{SE} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = \mu J^{-\beta} [\mathbf{C}_{il}^{-1} \mathbf{C}_{kj}^{-1} + \mathbf{C}_{ik}^{-1} \mathbf{C}_{jl}^{-1}] + \beta \mu J^{-\beta} \mathbf{C}_{ij}^{-1} \mathbf{C}_{kl}^{-1} \quad (4.8)$$

注意，上述格式的推导是基于非破坏性材料。在引入相场损伤变量后，上述公式均需乘以一个单调的退化函数，后面将给出。

### 4.2.3 扩散裂纹的相场描述

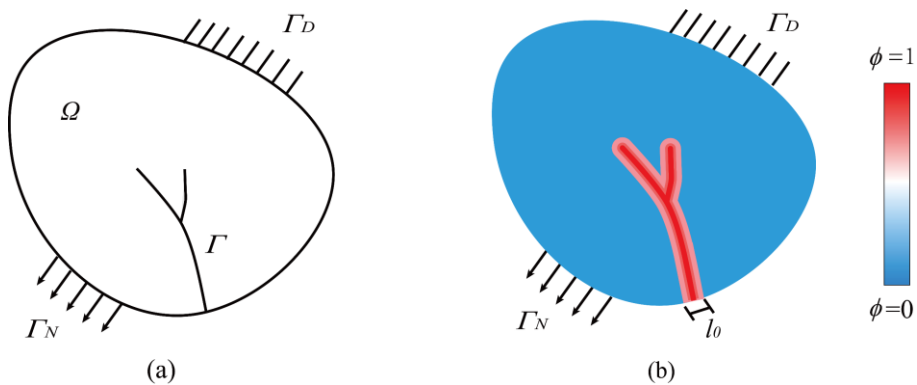


图 4.1 (a) 含不连续边界  $\Gamma$  的弹性体；(b) 扩散裂纹的相场近似。

相场思想的精髓是通过有限的扩散损伤带正则化尖锐的裂纹拓扑。让我们考

考虑将一个包含不连续边界  $\Gamma$  的任意的弹性体  $\Omega \subset \mathbb{R}^n, (n=2,3)$  作为参考构型，其表面被表示为  $\partial\Omega \subset \mathbb{R}^{n-1}$ ，如图 4.1(a) 所示。为了正则化不连续裂纹表面，一个时间依赖的相场损伤变量  $\phi(\mathbf{X}, t) \in [0,1]$  被引入。与前面章节类似， $\phi=0$  表示完好材料，而  $\phi=1$  代表裂纹，如图 4.1(b) 所示。根据变分相场理论，裂纹表面能可以近似为：

$$\Psi(\Gamma) = \int_{\Gamma} G_c dA \approx \int_{\Omega} G_c \gamma(\phi, \nabla \phi) dA \quad (4.9)$$

其中， $G_c$  是材料的断裂能， $\gamma$  是裂纹表面能密度。注意， $\gamma$  的表达式并不是唯一的，在本章节中，我们考虑采用第二章所给出的 AT1 和 AT2 两种具有代表性的格式<sup>[13, 42]</sup>。

以往的实验表明，小部分能量在裂纹尖端以声发射或热的形式耗散<sup>[43-45]</sup>。为此，在总的势能泛函  $\Pi$  中引入了一个耗散项：

$$\begin{aligned} \underbrace{\Pi(\mathbf{u}, \phi)}_{\text{total potential}} &= \underbrace{\int_{\Omega} g(\phi) \psi_0(\mathbf{F}) dV}_{\text{strain energy}} + \underbrace{\int_{\Omega} G_c \gamma(\phi, \nabla \phi) dV}_{\text{crack surface energy}} + \underbrace{\frac{\eta}{2} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)^2 dV}_{\text{dissipation}} \\ &\quad - \underbrace{\left( \int_{\Omega} \bar{\mathbf{b}} \cdot \mathbf{u} dV + \int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{t}} \cdot \mathbf{u} dA \right)}_{\text{external}} \end{aligned} \quad (4.10)$$

其中， $g(\phi) = (1-\phi)^2 + k$  是退化函数，其描述的是由于裂纹演化而引起的弹性能的衰减<sup>[46, 47]</sup>。 $\bar{\mathbf{b}}$  和  $\bar{\mathbf{t}}$  分别是体积和牵引力矢量。

#### 4.2.4 控制方程

通过对总的能量泛函  $\Pi$  进行变分运算，可以导出大变形下裂纹的相场描述的强形式的控制方程为

$$\begin{cases} \text{Div}[\mathbf{P}] + \bar{\mathbf{b}} = \mathbf{0} \\ \frac{G_c}{l_0} [\phi - l_0^2 \Delta \phi] + \eta \dot{\phi} = 2(1-\phi) \psi_0 \end{cases} \quad (4.11)$$

以及边界条件

$$\begin{cases} \mathbf{P} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} & \text{on } \Gamma_N \\ \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.12)$$

注意，在上述控制方程中引入了粘性正则化，从而得到了一个速率依赖的裂纹扩展模型<sup>[41, 48]</sup>。不过，一般的速率无关的模型可以很容易的被恢复通过设置  $\eta = 0$ 。

控制方程中涉及损伤的 PK1 应力可以表示为

$$\mathbf{P} = ((1-\phi)^2 + k) \mu [\mathbf{F} - J^{-\beta} \mathbf{F}^{-T}] \quad (4.13)$$

通常，裂纹被认为是无法愈合的（除了一些特殊的凝胶<sup>[49, 50]</sup>）。为此，我们强制执行  $\frac{\partial \phi}{\partial t} \geq 0$  以满足裂纹的不可逆性。此外，一个如下的非负耗散项

$$\mathcal{D} = \frac{\eta}{2} \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 d\Omega \geq 0 \quad (4.14)$$

也显式的满足热力学一致性条件<sup>[46,51]</sup>。值得一提的是，引入耗散项还可以稳定数值计算。

### 4.3 光滑有限元理论方面

在本节中，我们简要介绍了 S-FEM 的基本概念，即应变(梯度)平滑技术<sup>[19]</sup>。针对不同类型的光滑域，提出了若干具有不同特征的 S-FEM 族模型。在这些模型中，一个非常突出的 ES-FEM 被用来离散大变形断裂的相场模型控制方程。

#### 4.3.1 应变光滑技术

在标准的 FEM 中，完整的求解域  $\Omega$  被分割为一组单元  $\Omega_e$ 。通过位移场在单元水平上的梯度计算出相容应变场。整体刚度矩阵利用单元进行组装。然而，在 S-FEM 中，求解域  $\Omega$  被分割成一系列不重叠的光滑域  $\Omega_k^s (k=1, 2, \dots, N_{sd})$ ，其中  $N_{sd}$  是光滑域的总数，相应地，在光滑域  $\Omega_k^s$  中的材料点  $\mathbf{X}_{sd}^s$  的光滑应变被定义为

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_k(\mathbf{X}_{sd}^s) = \int_{\Omega_k^s} \boldsymbol{\varepsilon}^h \Phi_k(\mathbf{X} - \mathbf{X}_{sd}^s) d\Omega \quad (4.15)$$

其中， $\boldsymbol{\varepsilon}^h$  是相容应变张量， $\Phi_k(\mathbf{X} - \mathbf{X}_{sd}^s)$  是光滑函数，其满足

$$\Phi_k(\mathbf{X} - \mathbf{X}_{sd}^s) \text{ and } \int_{\Omega_k^s} \Phi_k(\mathbf{X} - \mathbf{X}_{sd}^s) d\Omega = 1 \quad (4.16)$$

为了简单起见，如下格式的 Heaviside 型函数被采用

$$\Phi_k(\mathbf{X} - \mathbf{X}_{sd}^s) = \begin{cases} 1/A_k, & \mathbf{X} \in \Omega_k^s \\ 0, & \mathbf{X} \notin \Omega_k^s \end{cases} \quad (4.17)$$

这里， $A_k = \int_{\Omega_k^s} d\Omega_k^s$  是所构造的平滑域  $\Omega_k^s$  的面积(体积)。

根据 Gauss 散度定理，可将公式 4.15 转换为

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_k = \frac{1}{A_k} \int_{\Gamma_k^s} \mathbf{n}_k^s(\mathbf{X}) \mathbf{u}^h(\mathbf{X}) d\Gamma \quad (4.18)$$

其中， $\Gamma_k^s = \partial\Omega_k^s$ ， $\mathbf{n}_k^s$  是由边界  $\Gamma_k^s$  上的外法向量分量组成的矩阵，其二维格式写为：

$$\mathbf{n}_k^s = \begin{bmatrix} n_{kx}^s & 0 \\ 0 & n_{ky}^s \\ n_{ky}^s & n_{kx}^s \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

其中， $n_{kx}^s$  和  $n_{ky}^s$  是边界  $\Gamma_k^s$  单位外法向量矢量分别在 x, y 轴上的投影。通过应变

平滑操作，消除了 S-FEM 中的传统的梯度运算。

### 4.3.2 ES-FEM 的构造

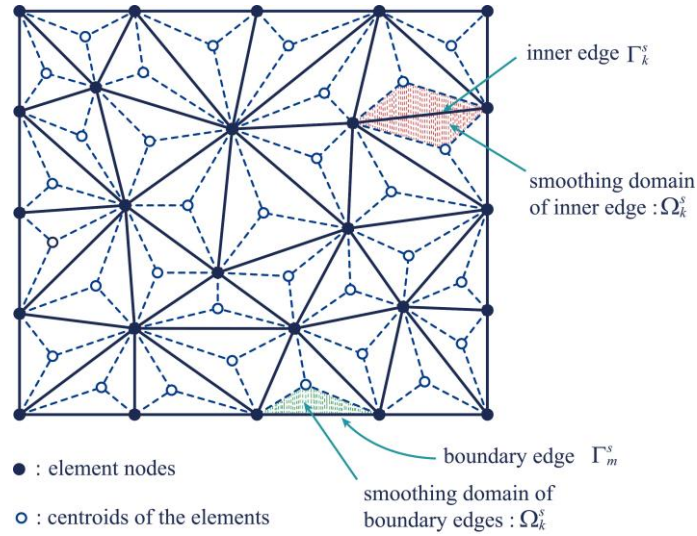


图 4.2 基于三节点线性三角形单元的 ES-FEM 中的光滑域示意图。

ES-FEM 是最受欢迎的一种 S-FEM<sup>[25]</sup>。在该框架中，基于元素的边缘构造平滑域，如图 4.2 所示。初始网格使用三节点线性三角形元素(T3)生成，同时生成一组单元边。接下来的任务是识别边是内部边还是边界边。以一个内部边  $\Gamma_k^s$  为例，其由两个相邻的单元支撑。将边缘的两个节点与支撑单元的质心连接，形成四边形的平滑域，如图 4.2 中的红色区域所示。而对于只有一个支撑单元的边界，其平滑域为三角形，如图 4.2 中绿色区域所覆盖。

基于上述方案，可得 ES-FEM 的平滑域面积为

$$A_k^s = \int_{\Omega_k^s} d\Omega = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{N_k} A_i^e \quad (4.20)$$

其中， $A_i^e$  和  $N_k$  分别是光滑域支撑单元的面积和数量。对于目前使用的 ES-FEM-T3 模型，光滑的  $\bar{\mathbf{B}}_l$  矩阵可以直接写出为

$$\bar{\mathbf{B}}_l = \frac{1}{A_k^s} \sum_{i=1}^{N_k} \left[ \frac{1}{3} A_i^e \mathbf{B}_i^e \right] \quad (4.21)$$

这里的  $\mathbf{B}_i^e$  是标准的应变-位移矩阵。

### 4.3.3 自适应网格方案

考虑到裂纹扩展路径的局部属性，断裂的相场建模是自适应网格算法的一个绝佳的应用场景<sup>[34, 38, 52]</sup>。针对 ES-FEM 与 PFM 的耦合，提出了一种高效的多级自适



应网格策略，其主要步骤如图 4.3 所示。初始几何是由单元级别记为 0 的三角形单元离散。在计算开始之前，我们定义单元细化准则  $\phi \geq 0.25$  以及最大的单元细化级别  $R_L$ 。然后，所有满足条件的三角形单元被平分成两个较小的三角形单元。当精细网格质量较差时，将执行基于最优 Delaunay 三角剖分的精细网格平滑方案<sup>[53]</sup>。重复上述操作，直到达到指定的细化级别。此外，单元级别的存储基于图 4.3 (a)所示的二叉树表，且相邻单元的级别相差不超过 1。与之对应的多级细化的网格配置如图 4.3 (b)-(d)所示。值得注意的是，细化网格可以重新粗化，具体细节见第二章节。网格细化完成后，我们将旧的节点数据，如单元连接性、位移场以及相场映射到当前网格节点。基于一个更新算法，重新生成边缘连接性、支撑单元等 ES-FEM 数据。本文提出的自适应网格的优异性能将在数值算例部分得到验证。

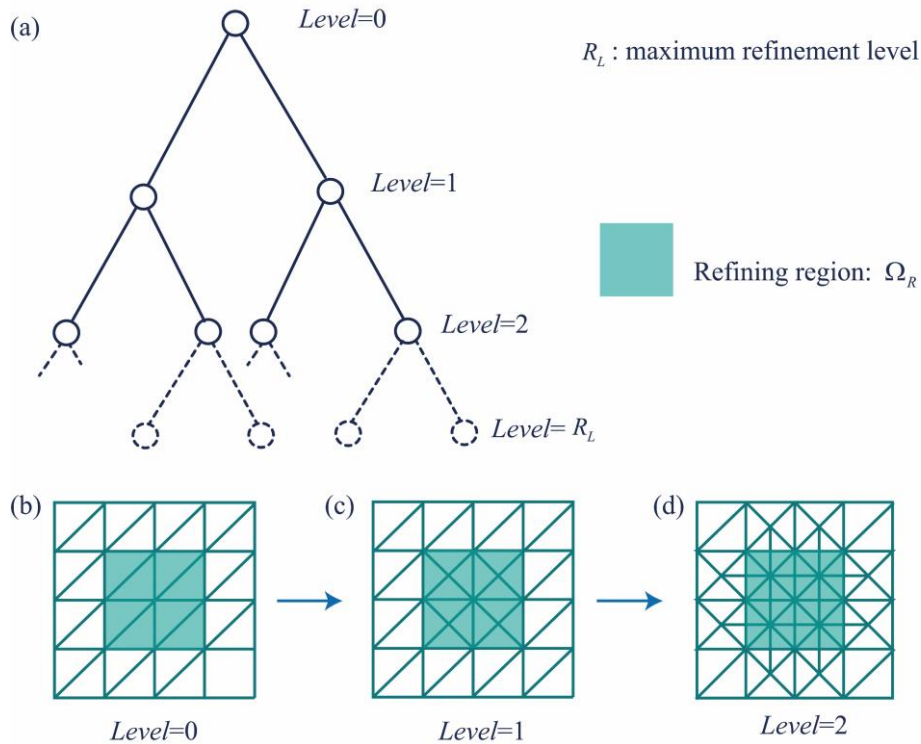


图 4.3 所提出的自适应网格细划策略的主要步骤。

## 4.4 数值实施

### 4.4.1 伽辽金弱形式

对于 ES-FEM，其弱形式的形成与常规有限元法一致。利用标准伽辽金加权余量法和分部积分法，可将式 4.11 给出的控制方程的弱形式表示为

$$\begin{cases} \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_0 \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Omega_0} \bar{\mathbf{b}} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Gamma_N} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 & \forall \delta \mathbf{u} \in \mathcal{V}_u \\ \int_{\Omega_0} -2(1-\phi) \delta \phi \psi_0 dV + \int_{\Omega_0} \left( G_c l_0 \nabla_0 \phi \cdot \nabla_0 \delta \phi + \frac{G_c}{l_0} \phi \delta \phi + \eta \dot{\phi} \delta \phi \right) dV = 0 & \forall \delta \phi \in \mathcal{V}_\phi \end{cases} \quad (4.22)$$

这里,  $\delta \mathbf{u}$  和  $\delta \phi$  是试函数。 $\mathcal{V}_u$  和  $\mathcal{V}_\phi$  分别是位移和相场允许的试空间。其遵循

$$\begin{cases} \mathcal{V}_u = \{ \delta \mathbf{u} \mid \delta \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ on } \partial \Omega_0 \} \\ \mathcal{V}_\phi = \{ \delta \phi \mid \delta \phi = 0 \text{ on } \Gamma_c \} \end{cases} \quad (4.23)$$

#### 4.4.2 线性化

方程 4.22 是一组非线性的耦合方程, 我们首先将其线性化, 建立其牛顿-拉普森迭代格式, 如下所示

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial \phi} \\ \frac{\partial \mathbf{R}_\phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{R}_\phi}{\partial \phi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \phi \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{R}_u \\ \mathbf{R}_\phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

这里,  $\mathbf{R}_u$  和  $\mathbf{R}_\phi$  是残余矢量, 其定义为

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_u &= \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_0 \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Omega_0} \bar{\mathbf{b}} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Gamma_N} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dA \\ \mathbf{R}_\phi &= \int_{\Omega_0} -2(1-\phi) \delta \phi \psi_0 dV + \int_{\Omega_0} \left( G_c l_0 \nabla_0 \phi \cdot \nabla_0 \delta \phi + \frac{G_c}{l_0} \phi \delta \phi + \eta \dot{\phi} \delta \phi \right) dV \end{aligned} \quad (4.25)$$

考虑到能量泛函的非凸性  $\Pi(\mathbf{u}, \phi)$ , 方程 4.24 的 monolithic 求解的稳定性无法保证<sup>[41, 48]</sup>。因此, 我们采用 Miehe 等人<sup>[47]</sup>开发一种稳定的 staggered 算法, 方程 4.26 可以重新写为

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial \mathbf{u}} \cdot \Delta \mathbf{u} + \mathbf{R}_u = \mathbf{0} \\ \frac{\partial \mathbf{R}_\phi}{\partial \phi} \cdot \Delta \phi + \mathbf{R}_\phi = \mathbf{0} \end{cases} \quad (4.26)$$

其中, 方向导数  $\frac{\partial \mathbf{R}_u}{\partial \phi} = \frac{\partial \mathbf{R}_\phi}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{0}$ 。需要注意的是, 上式的求解需要采用较小的加载增量以保证精度。

#### 4.4.3 基于 ES-FEM 的离散化

如前所述, 我们使用的是 T3 单元进行空间离散化。位移场  $\mathbf{u}$ , 相场  $\phi$  以及其

梯度在 FEM 框架下可以表示为

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{N}_i^u \mathbf{u}_i, \quad \phi = \sum_{i=1}^m N_i \phi_i, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{B}_i^u \mathbf{u}_i, \quad \nabla \phi = \sum_{i=1}^m \mathbf{B}_i^\phi \phi_i \quad (4.27)$$

以及

$$\mathbf{N}_i^u = \begin{bmatrix} N_i & 0 \\ 0 & N_i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_i^u = \begin{bmatrix} N_{i,x} & 0 \\ 0 & N_{i,y} \\ N_{i,y} & N_{i,x} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_i^{\phi} = \begin{bmatrix} N_{i,x} \\ N_{i,y} \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

其中,  $N_i$  是 T3 单元的形函数,  $m$  是单元节点总数。相反地, 在 ES-FEM 框架下, 所有的梯度矩阵如  $\mathbf{B}_i^u$  和  $\mathbf{B}_i^\phi$  按照公式 4.21 进行光滑操作, 并以上标  $(\bar{\cdot})$  进行区分, 比如  $\bar{\mathbf{B}}_i^\phi$ 。

对于所引入的时间依赖的耗散项, 利用向后欧拉差分格式得到

$$\dot{\phi} = \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t} \quad (4.29)$$

这里,  $\phi_n$  代表时间  $t_n$  时的相场值,  $\Delta t$  是时间步长。

将方程 4.27-29 代入方程 4.26, 则可以得到

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{K}}_{uu} \cdot \Delta \mathbf{u} &= -\bar{\mathbf{f}}^u \\ \bar{\mathbf{K}}_{\phi\phi} \cdot \Delta \phi &= -\bar{\mathbf{f}}^\phi \end{aligned} \quad (4.30)$$

其中, 光滑的刚度矩阵  $\bar{\mathbf{K}}_{uu}$  和  $\bar{\mathbf{K}}_{\phi\phi}$  可以导出为

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{K}}_{uu} &= \bar{\mathbf{K}}^{\text{mat}} + \bar{\mathbf{K}}^{\text{geo}} \\ &= \int_{\Omega_k} \bar{\mathbf{B}}_0^T \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{B}}_0 d\Omega + \int_{\Omega_k} \bar{\mathbf{B}}^T \tilde{\mathbf{S}} \bar{\mathbf{B}} d\Omega \\ &= \sum_{k=1}^{N_{sd}} \bar{\mathbf{B}}_0^T \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{B}}_0 A_k^s + \sum_{k=1}^{N_{sd}} \bar{\mathbf{B}}^T \tilde{\mathbf{S}} \bar{\mathbf{B}} A_k^s \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{K}}_{\phi\phi} &= \int_{\Omega_k} \left[ \bar{\mathbf{B}}_\phi^T G_c l_0 \bar{\mathbf{B}}_\phi + \bar{N}_\phi \left( 2\psi_0 + \frac{G_c}{l_0} \right) \bar{N}_\phi^T + \frac{\eta}{\Delta t} \bar{N}_\phi \bar{N}_\phi^T \right] d\Omega \\ &= \sum_{k=1}^{N_{sd}} \left[ \bar{\mathbf{B}}_\phi^T G_c l_0 \bar{\mathbf{B}}_\phi + \bar{N}_\phi \left( 2\psi_0 + \frac{G_c}{l_0} \right) \bar{N}_\phi^T + \frac{\eta}{\Delta t} \bar{N}_\phi \bar{N}_\phi^T \right] A_k^s \end{aligned} \quad (4.32)$$

此外, 光滑的梯度矩阵给出如下

$$\bar{\mathbf{B}}_0 = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{B}}_{I1} \bar{F}_{11} & \bar{\mathbf{B}}_{I1} \bar{F}_{21} \\ \bar{\mathbf{B}}_{I2} \bar{F}_{12} & \bar{\mathbf{B}}_{I2} \bar{F}_{12} \\ \bar{\mathbf{B}}_{I1} \bar{F}_{12} + \bar{\mathbf{B}}_{I2} \bar{F}_{11} & \bar{\mathbf{B}}_{I1} \bar{F}_{22} + \bar{\mathbf{B}}_{I2} \bar{F}_{21} \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

$$\bar{\mathbf{B}} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{B}}_{I1} & \mathbf{0} \\ \bar{\mathbf{B}}_{I2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \bar{\mathbf{B}}_{I1} \\ \mathbf{0} & \bar{\mathbf{B}}_{I2} \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

其中光滑的形变梯度定义为

$$\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{I} + \bar{\mathbf{H}} = \mathbf{I} + \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{B}}_{I1} \\ \bar{\mathbf{B}}_{I2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_x \\ \mathbf{u}_y \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

在存在相场损伤的情况下，将切线模量(式 4.8)乘以退化函数  $g(\phi)$ ，可得

$$\bar{\mathbf{C}} = ((1-\phi)^2 + k)[\mu J^{-\beta} [\bar{\mathbf{C}}_{il}^{-1} \bar{\mathbf{C}}_{kj}^{-1} + \bar{\mathbf{C}}_{ik}^{-1} \bar{\mathbf{C}}_{jl}^{-1}] + \beta \mu \bar{J}^{-\beta} \bar{\mathbf{C}}_{ij}^{-1} \bar{\mathbf{C}}_{kl}^{-1}] \quad (4.36)$$

其中， $\bar{\mathbf{C}}_{ij}$  是光滑的右柯西-格林应变矩阵，其表达式为

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{H}}^T + \bar{\mathbf{H}} + \bar{\mathbf{H}} \cdot \bar{\mathbf{H}}^T + \mathbf{I} \quad (4.37)$$

出现在方程 4.31 中的  $\tilde{\mathbf{S}}$  定义为

$$\tilde{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{S}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \bar{\mathbf{S}} \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

在这里，合并了相场损伤变量的 PK2 应力  $\bar{\mathbf{S}}$  导出为

$$\bar{\mathbf{S}} = ((1-\phi)^2 + k)\mu(\mathbf{I} - \bar{J}^{-\beta} \bar{\mathbf{C}}^{-1}) \quad (4.39)$$

类似于刚度矩阵的建立，我们推导了 ES-FEM 框架下的残余矢量

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{f}}^u = \sum_{k=1}^{N_{sd}} \bar{\mathbf{B}}_0 \{\bar{\mathbf{S}}\} A_k^s \\ \bar{\mathbf{f}}^\phi = \sum_{k=1}^{N_{sd}} \left[ \bar{\mathbf{B}}_\phi^T G_c l_0 \bar{\mathbf{B}}_\phi \phi_{n+1} - \bar{N}_\phi 2\psi_0(1-\phi_{n+1}) + \bar{N}_\phi \frac{G_c}{l_0} \phi_{n+1} + \frac{\eta}{\Delta t} \bar{N}_\phi (\phi_{n+1} - \phi_n) \right] A_k^s \end{cases} \quad (4.40)$$

其中

$$\{\bar{\mathbf{S}}\} = \begin{bmatrix} \bar{S}_{11} \\ \bar{S}_{22} \\ \bar{S}_{12} \end{bmatrix} \quad (4.41)$$

#### 4.4.4 不可逆约束

裂纹通常被认为是无法愈合的。因此，研究人员提出了许多强制裂纹不可逆性的方法<sup>[35,47,54]</sup>。其中，在当前的模拟中采用了一种名为激活集的方法<sup>[48]</sup>。根据  $\Delta\phi$  的正负，将与相场变量计算有关的方程分解为一个激活集  $\mathcal{I} = \{i | \Delta\phi < 0\}$  及其补集  $\mathcal{I}'$ 。因此，我们只需要求解一个基于激活集缩减的方程组，即

$$\Delta\phi_{\mathcal{I}'} = -(\mathbf{K}^{\phi\phi})_{\mathcal{I}'\mathcal{I}'}^{-1} (\mathbf{f}^\phi)_{\mathcal{I}'} \quad (4.42)$$

与此同时，在每一个牛顿迭代直接设置  $\Delta\phi_{\mathcal{I}} = 0$ 。以上操作会被反复执行直到集合  $\{i | \Delta\phi < 0\}$  为空。

#### 4.4.5 求解流程

本章所提出的大变形断裂相场模拟的 ES-FEM 方案完全在 MATLAB 2018a

中实现。为节省计算资源，我们采用了自适应的网格细化和自适应时间步策略。为清晰起见，在算法 1 中总结了主要的求解步骤。

---



---

### Algorithm 1

---

1. 利用 T3 单元生成初始 FEM 网格， $E_{Level} = 0$ 。
  2. 在初始有限元网格的基础上得到 ES-FEM 数据。
  3. 初始化位移场  $\mathbf{u}_0$  相场  $\phi_0$  在时间  $t_0$ 。
  4. 执行一个 staggered 迭代策略在时间步  $[t_n, t_{n+1}]$ :
    - 4.1. 初始化容差  $tol = 1$ 。
    - 4.2. 当容差满足:  $tol \geq 10^{-4}$ , 运行:
      - 4.2.1. 组装光滑的刚度矩阵  $\bar{\mathbf{K}}_{i+1}^{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{K}}_{i+1}^{\phi}$  以及残余矢量  $\bar{\mathbf{f}}_{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{f}}_{\phi}$  基于光滑域。
      - 4.2.2. 基于方程 4.30 以及输入的  $\mathbf{u}_n$  和  $\phi_n$ , 求解  $\mathbf{u}_{n+1}^{i+1}$  和  $\phi_{n+1}^{i+1}$ 。
      - 4.2.3. 更新容差通过
 
$$tol = \max \left\{ \frac{\|\bar{\mathbf{f}}_{i+1}^{\mathbf{u}}\|}{\|\bar{\mathbf{f}}_0^{\mathbf{u}}\|}, \frac{\|\bar{\mathbf{f}}_{i+1}^{\phi}\|}{\|\bar{\mathbf{f}}_0^{\phi}\|} \right\} \quad (4.43)$$
    - 4.3. 输出当前时间步的  $\mathbf{u}_{n+1}$  和  $\phi_{n+1}$ 。
  5. 对节点的相场值满足  $\phi_i \geq 0.25$  的 T3 单元进行网格细化。
  6. 将旧的单元节点数据映射到新的单元节点。
  7. 自适应的调整时间步长  $\Delta t$  以及加载步长根据  $\phi_{n+1} - \phi_n$  的变化 (具体算法见 [48])。
  8. 推进到下一个时间不并重复操作 4-7。
  9. 数据可视化。
- 
- 

## 4.5 数值算例

在本节中，我们通过四个典型的算例（已经有文献或实验报道的结果）来验证所提出的方法 (ES-FEM&APFM) 的优良性能: (i)具有可变长度缺口的双边拉伸试样; (ii)含有中心裂纹的平板在受拉情况下发生断裂; (iii)含孔板的裂纹扩展; (iv)含界面超弹性材料的裂纹偏转。顺便说一下，示例 (i) 使用 AT2 相场模型，而其余的算例使用 AT1 相场模型。为了可信度考虑，我们的模拟结果也与以往的实验和模拟结果进行了比较。

## 4.5.1 具有可变长度缺口的双边拉伸试样

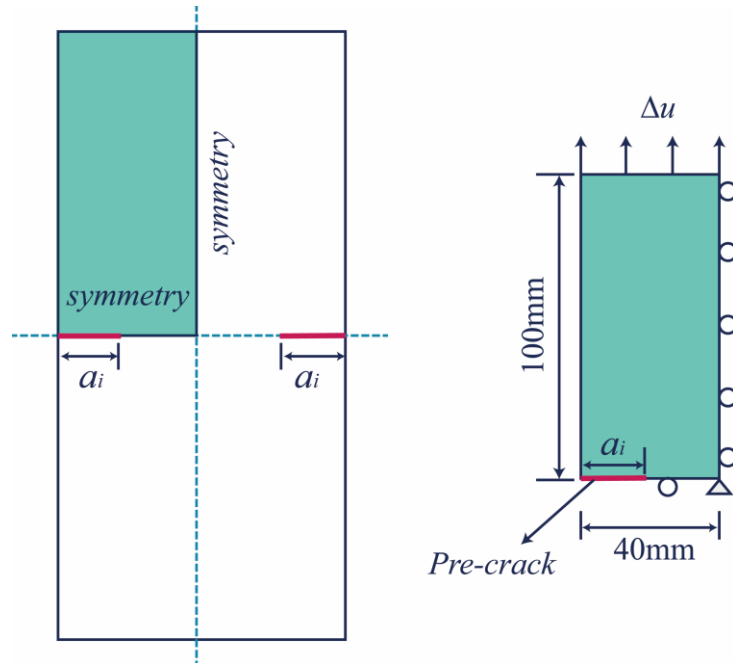


图 4.4 双边缺口试样的几何和边界条件示意图。

这个算例来自于 Hocine 等人的实验<sup>[41, 55]</sup>，目前已经被当作一个基准测试。几何形状和边界条件符合实验设置，如图 4.4 所示。利用几何对称性，仅考虑四分之一的计算域（ $40\text{ mm} \times 100\text{ mm}$ ）。初始的裂纹长度  $a_i$  是可变的，其值分别取  $a_i = \{12, 16, 20, 24, 28\}$ 。对于 Neo-Hookean 模型（方程 4.5），必要的材料参数设置为  $\mu = 0.612\text{ N/mm}^2$ ， $\nu = 0.45$ ， $G_c = 7.5\text{ N/mm}$ 。所采用的正则化参数设置为  $l_0 = 1\text{ mm}$ 。相应地，临近裂纹路径的有效网格尺寸被设置为  $h_f \approx l_0/8$ 。得益于自适应网格算法，初始阶段单元总数只有 3092 个，随着裂纹的扩展最终达到 18532 个。出于数值稳定性考虑，引入了一个非零的粘度系数  $\eta = 1 \times 10^{-3}$  以及自适应的时间和加载步长，相应的算法可以参考 Loew 等人的工作<sup>[48]</sup>。图 4.5 展示了预裂纹  $a_i = 16\text{ mm}$  的试样在五个不同载荷状态的裂纹演化以及相应的自适应网格。为了可视化大变形下的裂纹张开轮廓，相场  $\phi > 0.8$  的等高线所覆盖的单元被从当前构型中删除。从裂纹萌生到最终的完全断裂，我们的模拟结果与文献所报道的非常相似。一个值得注意的事实是，所提出的自适应 ES-FEM 可以显著提高计算效率，从图 4.5(f) - (g) 可以看出来。在目前的测试中，它比标准的 ES-FEM 大约快 20 倍。此外，我们还记录了加载阶段不同预裂长度的荷载-位移曲线，如图 4.6 中实线所示。显然，仿真结果与文献中提取的实验测量值吻合较好（图 4.6 中虚线所示）。

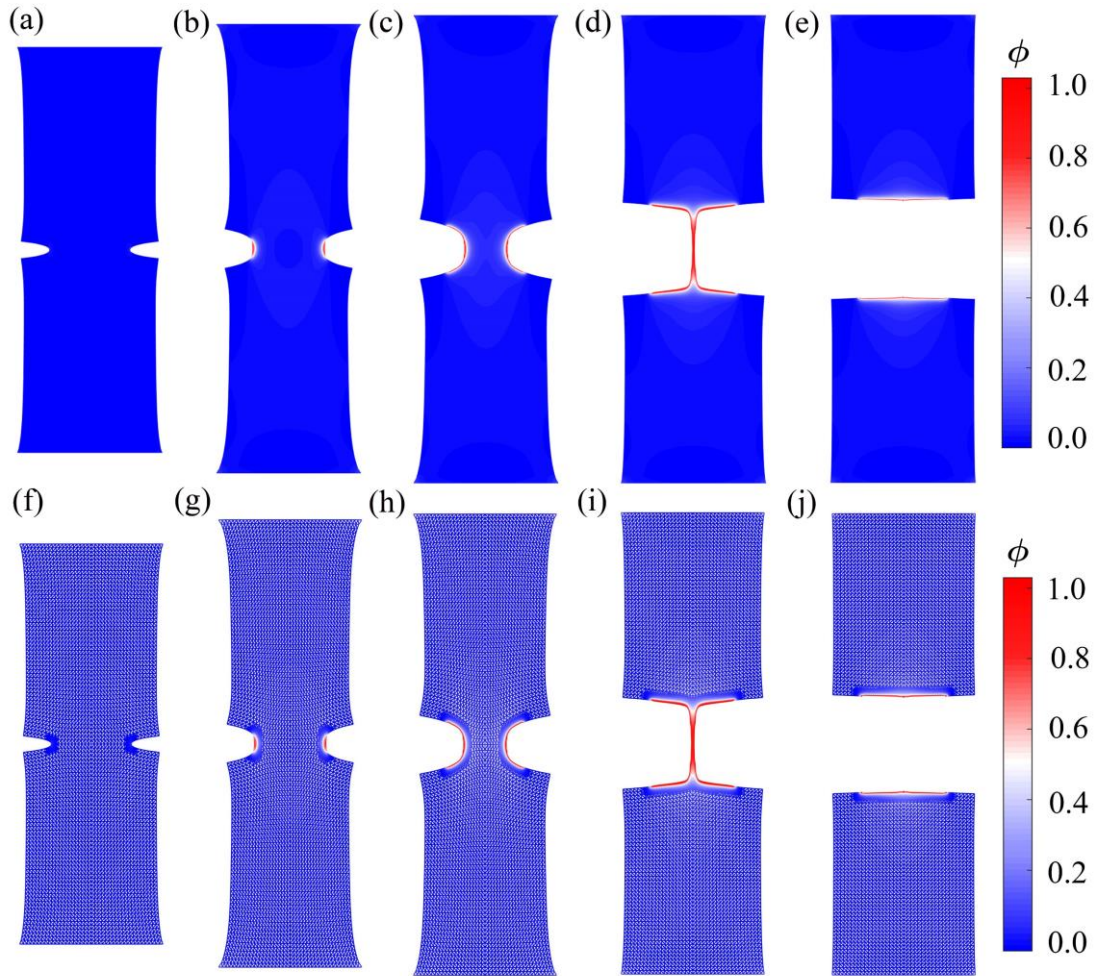


图 4.5 预裂纹长度  $a_i = 16$  mm 双边拉伸试样在载荷分别为  $\Delta u = 25.0000$  mm ,  $\Delta u = 56.0000$  mm ,  $\Delta u = 58.2610$  mm ,  $\Delta u = 58.2614$  mm ,  $\Delta u = 58.2616$  mm 的裂纹演化规律及其自适应网格。

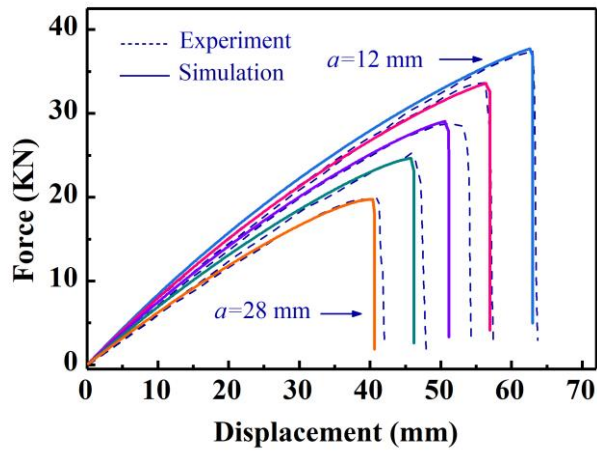


图 4.6 五种不同切口长度为  $a_i = 12, 16, 20, 24, 28$  mm 的拉伸试样的力-位移曲线仿真结果与实验对比。

### 4.5.2 包含中心裂纹的平板断裂

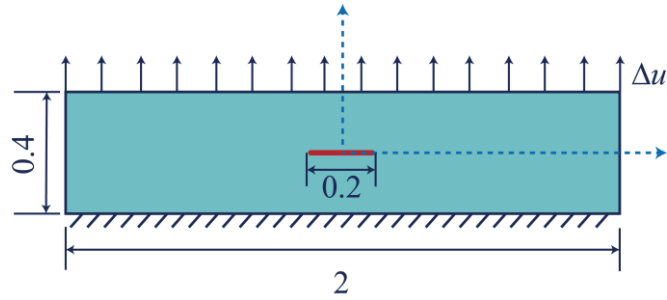


图 4.7 包含中心裂纹拉伸试验的平板的初始几何形状和边界条件示意图(尺寸为 mm)。

在该测试中，初始几何形状和边界条件根据基准确定<sup>[33, 41]</sup>，如图 4.8 所示。同样地，出于对称性，只有四分之一的试样参与了计算。由垂直位移控制的载荷增量随相场的增量而自适应地调整。为了与 Kumar 等人<sup>[2]</sup>的结果进行比较，我们将本构模型（方程 4.5）调整为

$$\psi_0(\mathbf{F}) = \frac{\mu}{2} [\text{tr}[\mathbf{F}^T \mathbf{F}] - 3] + \frac{\mu^2}{\Lambda} [(J^{-\Lambda/\mu} - 1)] \quad (4.44)$$

其中材料参数被设置为  $\mu = 5 \text{ N/mm}^2$ ， $\Lambda = 7.5 \text{ N/mm}^2$ 。临界断裂能  $G_c$  为  $3 \text{ N/mm}$ ，正则化参数设置为  $l_0 = 0.01 \text{ mm}$ 。

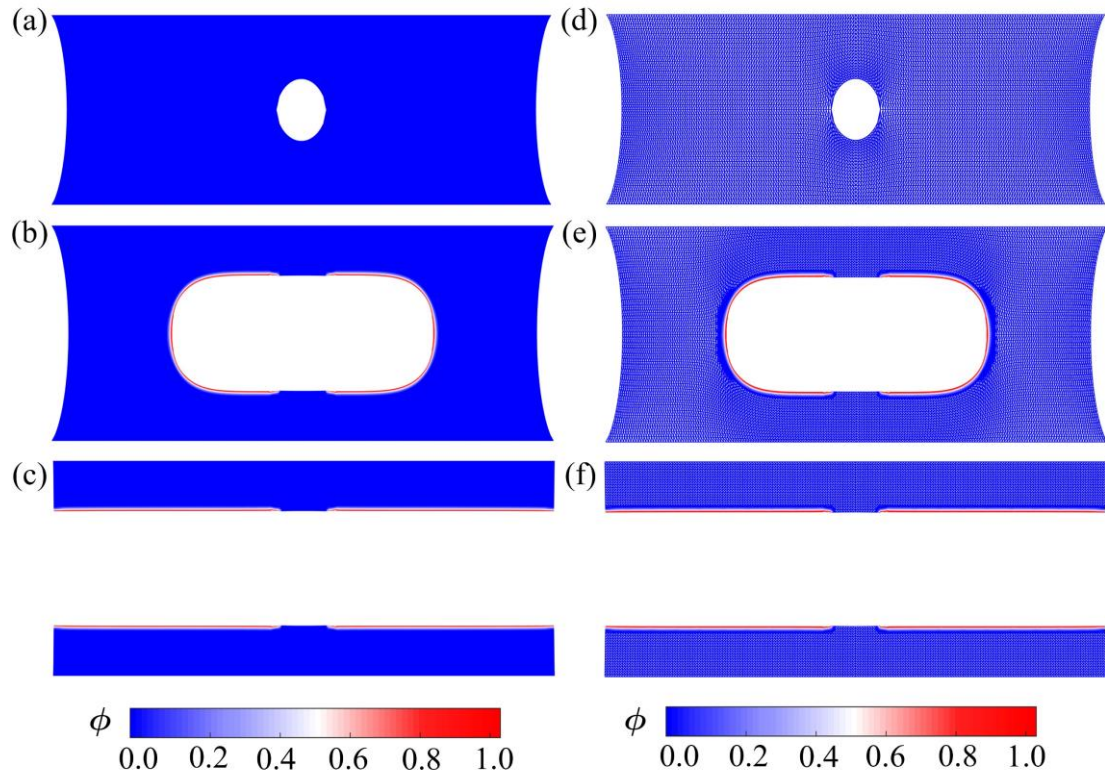


图 4.8 在不同加载位移时含中心裂纹板拉伸试验的裂纹形态及其对应的自适应网格。



与前面的例子一样，我们也采用了自适应 ES-FEM 算法。从裂纹萌生到完全断裂的三种不同变形状态下的（ $\Delta u = 0.2600 \text{ mm}$ ， $\Delta u = 0.4680 \text{ mm}$ ， $\Delta u = 0.4736 \text{ mm}$ ）裂纹形态及其相应的自适应网格如图 4.8 所示。从直观上看，裂纹模式几乎与文献中的相同。出于综合考虑，得出的力-位移曲线 (ES-FEM&APFM 标记) 与文献进行了比较。如图 4.9 所示，两条曲线的匹配总体是令人满意的，弹性阶段的差异可能来自于 ES-FEM 的刚度相比 FEM 较软。值得一提的是，在相同的网格情况下，标准有限元法收敛缓慢且不稳定。然而，ES-FEM&APFM 并没有遇到这个问题。

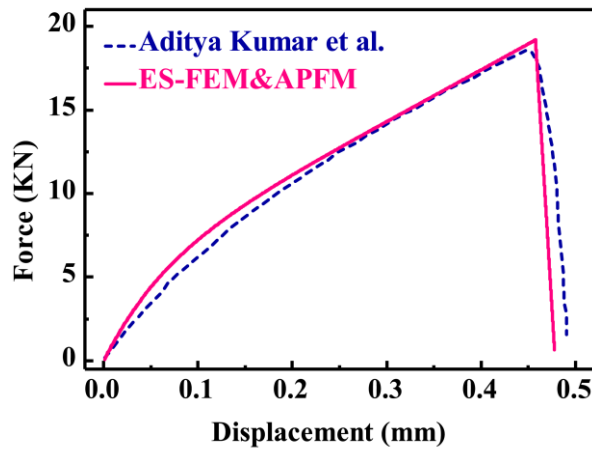


图 4.9 含中心裂纹板拉伸实验的载荷-位移曲线。

### 4.5.3 含孔板的裂纹扩展测试

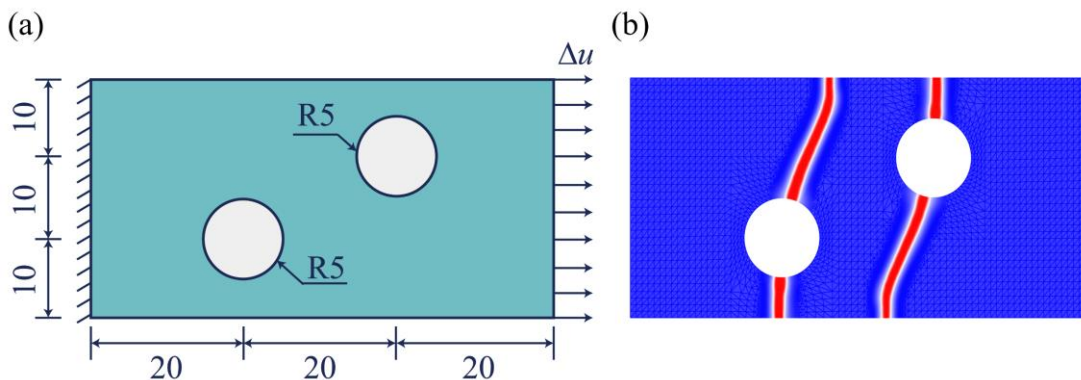


图 4.10 (a)含孔板拉伸测试的初始几何形状和边界条件的说明(尺寸 mm)；(b)初始构型下的最终裂纹模式。

这个算例涉及大变形下由两个偏心孔偏转的曲线裂纹的传播。初始几何形状和所施加的边界条件在图 4.10(a)中给出。在初始构型背景下，最终的裂纹模式如图 4.10(b)所示。在约束左侧边缘的同时，我们在右侧边缘上施加自适应的水平位

移载荷。我们假设材料参数为  $\mu = 0.28 \text{ N/mm}^2$  ,  $\nu = 0.45$  ,  $G_c = 1.4 \text{ N/mm}$  ,  $\eta = 1 \times 10^{-3}$  以及  $l_0 = 0.5 \text{ mm}$  。自适应网格被采用以提高计算效率, 其中精细的网格尺度约为  $h_f = l_0 / 5$  。注意, 在本例中我们没有设置一个显式的预裂纹。随着所施加的恒定位移增量加载的累积, 孔洞周围的应力超过阈值  $\sigma_c$  后, 裂纹随即开始产生, 如图 4.11(a)所示。之后, 我们施加一个自我调节的缓慢加载, 直到完全断裂。图 4.11(b)-(e)中显示了几种不同变形状态下裂纹图形的快照。此外, 图 4.11 (f)-(j)给出了相应自适应网格的演化过程, 清晰地展示了算法的有效性。本例的裂纹扩展模式与 Miehe 等人的极为相似<sup>[56]</sup>, 比如最终的三段破碎。

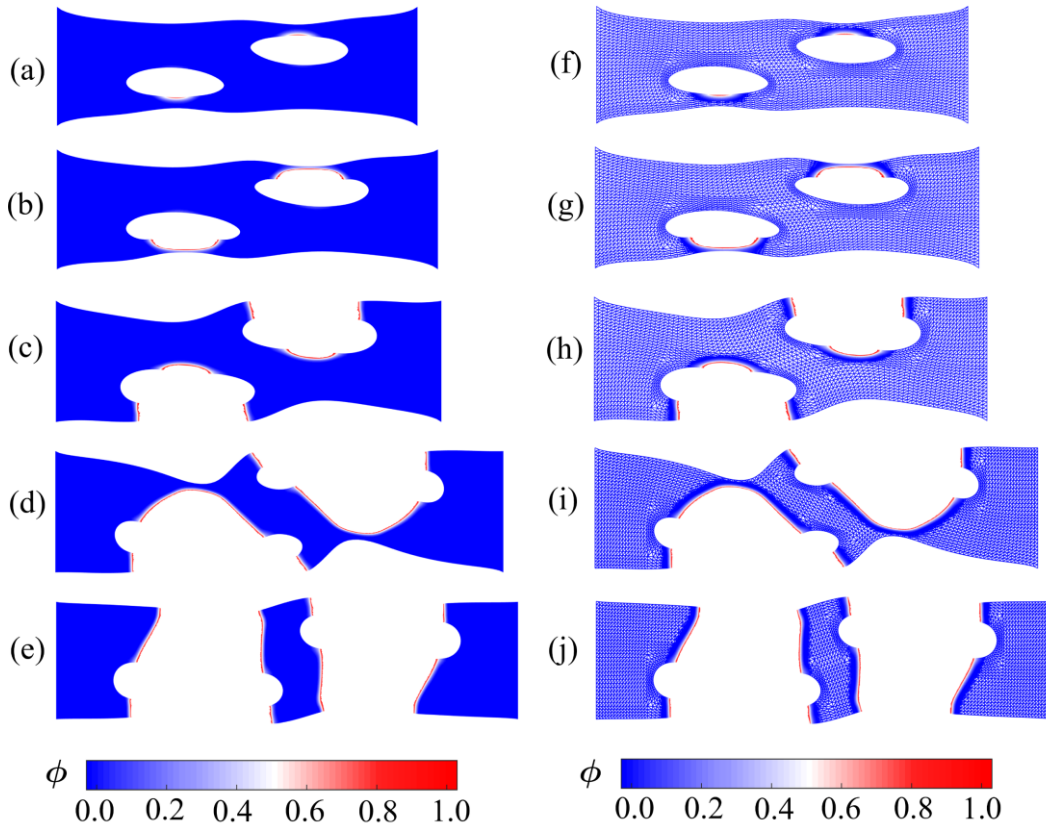


图 4.11 含孔板在加载分别为  $\Delta u = 17.5000 \text{ mm}$  ,  $\Delta u = 17.6050 \text{ mm}$  ,  $\Delta u = 17.6057 \text{ mm}$  ,  $\Delta u = 27.1451 \text{ mm}$  ,  $\Delta u = 31.1287 \text{ mm}$  时的裂纹模式快照和相应的自适应网格。

#### 4.5.4 含界面的超弹性材料的裂纹偏转

本试验旨在研究弱界面对超弹性材料(如橡胶和水凝胶)裂纹扩展的偏转效应<sup>[57,58]</sup>。首先, 我们考虑一个宽度为  $24 \text{ mm}$  , 高度为  $120 \text{ mm}$  的矩形条带, 如图 4.12(a)所示。在样本的中间高度, 从左侧边缘切出一个长度为  $12 \text{ mm}$  的水平缺口。上下边缘施加对称的位移载荷。在水平位置的对称中心, 一个  $0.8 \text{ mm}$  宽的弱界面被创建通过指定  $G_c^{bulk} / G_c^{interface} \geq 10$  基于自适应的网格细化。这里的  $G_c^{bulk}$  和  $G_c^{interface}$  分别表示体和弱界面的临界断裂能。该测试中必要的材料参数设置为

$\mu = 0.035 \text{ N/mm}^2$  ,  $\nu = 0.45$  ,  $G_c^{bulk} = 0.034 \text{ N/mm}$  ,  $G_c^{interface} = 0.0017 \text{ N/mm}$  ,  $\eta = 1 \times 10^{-3}$  以及  $l_0 = 0.2 \text{ mm}$  。图 4.12(b)为三种不同加载阶段的断裂形态。正如所观察到的, 裂纹没有直接穿透界面, 取而代之的是在弱界面处发生裂纹偏转。有趣的是, 这个结果与图 4.12(c)所示的实验照片吻合得很好, 这一结果有力的证实了相场以及所采用的 ES-FEM 方法的有效性。此外, 一些没有在这里给出的模拟结果表明, 裂纹穿透与偏转很大程度上依赖于  $G_c^{bulk} / G_c^{interface}$  的值, 不过, 我们不打算在这里展开这个问题。

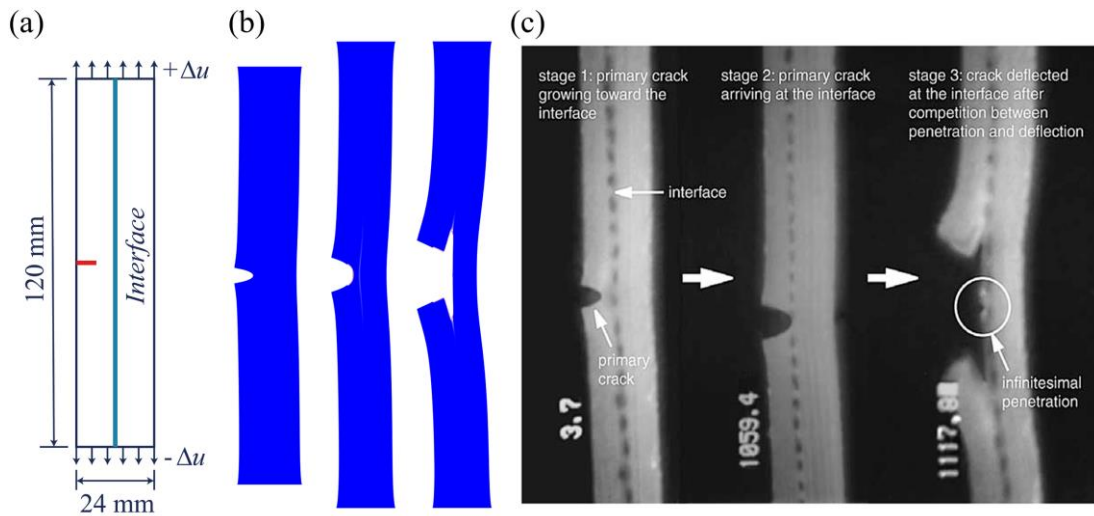


图 4.12 含界面的超弹性材料的裂纹偏转。(a)初始几何形状和边界条件；(b)三个不同变形阶段的裂纹形态；(c)双层橡胶界面断裂的实验快照。

## 4.6 小结

本章的工作首次在 ES-FEM 框架中构造了大变形断裂的相场模型。PFM 所具有的独特性质赋予了其在模拟断裂方面无与伦比的优势。ES-FEM 是通过将 FEM 和无网格概念结合在一起而开发的, 具有高精度和对单元畸变不敏感的特性。当前的工作将 PFM 与 ES-FEM 结合在一起, 这为在大变形下的断裂建模提供了一种新颖的方法。但是, PFM 通常需要精细的网格划分才能正确识别裂纹轨迹, 并且 ES-FEM 的刚度矩阵的带宽大于常规 FEM 的带宽。因此, 尽管这两种方法的组合相比现有的方案精度更高, 收敛更快以及更加稳健, 但其被证实是计算苛刻的。因此, 我们提出了一种用于 ES-FEM 和 PFM 耦合的多级自适应网格方案。此外, 我们还概述了所提出方法 (ES-FEM&APFM) 的具体数值实现, 其有效性已通过几个有代表性的数值示例得到了验证。特别是, 通过我们的方法首次再现了在类橡胶固体中的弱界面阻挠裂纹扩展的实验。在后续的工作中, 我们将对弱界面对大变形时裂纹穿透与偏转的竞争的影响进行深入研究。

## 4.7 附录

本节我们给出一些连续介质中常用的张量推导:

四阶单位张量  $\mathbb{I}$  和  $\bar{\mathbb{I}}$  定义为:

$$\mathbf{A} = \mathbb{I} : \mathbf{A}, \mathbf{A}^T = \bar{\mathbb{I}} : \mathbf{A}, \quad (4.45)$$

其中  $\mathbf{A}$  为任意二阶张量, 其中的四阶张量  $\mathbb{I}$  和  $\bar{\mathbb{I}}$  也可以写为:

$$\begin{aligned} \mathbb{I} &= \delta_{ik} \delta_{jl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \\ \bar{\mathbb{I}} &= \delta_{il} \delta_{jk} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l = \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i \end{aligned} \quad (4.46)$$

一个二阶张量的偏分量可以写为:

$$\text{dev} \mathbf{A} = \mathbf{A} - \frac{1}{3} (\mathbf{I} : \mathbf{A}) \mathbf{I} = \left( \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right) : \mathbf{A} \quad (4.47)$$

定义一个四阶投影张量  $\mathbb{P}$ , 式 4.49 改写为:

$$\text{dev} \mathbf{A} = \mathbb{P} : \mathbf{A} \quad (4.48)$$

其中

$$\mathbb{P} = \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \quad (4.49)$$

在推导四阶弹性张量时, 一些常用的矩阵求导格式:

$$\frac{\partial \det \mathbf{A}}{\partial \mathbf{A}} = \det \mathbf{A} \mathbf{A}^{-T} \quad (4.50)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}^{-1}}{\partial \mathbf{A}} = -\frac{1}{2} \left( A_{ik}^{-1} A_{lj}^{-1} + A_{il}^{-1} A_{kj}^{-1} \right) \quad (4.51)$$

$$\frac{\partial \text{tr} \mathbf{A}}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{I}, \quad \frac{\partial \text{tr}(\mathbf{A}^2)}{\partial \mathbf{A}} = 2\mathbf{A}^T, \quad (4.52)$$

$$\frac{\partial \text{tr} \mathbf{A}}{\partial \mathbf{A}} : \mathbf{B} = \mathbf{B} : \frac{\partial \text{tr} \mathbf{A}}{\partial \mathbf{A}} = \mathbf{B} \quad (4.53)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A} : \mathbf{B}}{\partial \mathbf{C}} = \mathbf{A} : \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \mathbf{C}} + \mathbf{B} : \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{C}} \quad (4.54)$$

考虑一个张量  $\mathbf{C}$  的谱分解为:

$$\mathbf{C} = \sum_a^3 \lambda_a \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{n}_a \quad (4.55)$$

那么

$$\frac{\partial \lambda_a}{\partial \mathbf{C}} = \sum_a^3 \mathbf{n}_a \otimes \mathbf{n}_a, \quad \frac{\partial \lambda_a}{\partial \mathbf{n}_a} = \sum_{b \neq a}^3 \frac{1}{2(\lambda_a - \lambda_b)} \mathbf{n}_b \otimes (\mathbf{n}_a \otimes \mathbf{n}_b + \mathbf{n}_b \otimes \mathbf{n}_a), \quad (4.56)$$

## 参考文献

- [1] Bai R, Yang J, Morelle XP, Yang C, Suo Z. Fatigue fracture of self-recovery hydrogels[J]. *ACS Macro Letters*, 2018, 7: 312-317.
- [2] Guo J, Liu M, Zehnder AT, Zhao J, Narita T, Creton C, Hui C-Y. Fracture mechanics of a self-healing hydrogel with covalent and physical crosslinks: A numerical study[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 120: 79-95.
- [3] Jang K-I, Chung HU, Xu S, Lee CH, Luan H, Jeong J, Cheng H, Kim G-T, Han SY, Lee JW. Soft network composite materials with deterministic and bio-inspired designs[J]. *Nature Communications*, 2015, 6: 6566.
- [4] Kim C-C, Lee H-H, Oh KH, Sun J-Y. Highly stretchable, transparent ionic touch panel[J]. *Science*, 2016, 353: 682-687.
- [5] Elmukashfi E, Kroon M. Numerical analysis of dynamic crack propagation in biaxially strained rubber sheets[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2014, 124-125: 1-17.
- [6] Elmukashfi E, Kroon M. Numerical analysis of dynamic crack propagation in rubber[J]. *International Journal of Fracture*, 2012, 177: 163-178.
- [7] Trapper P, Volokh K. Cracks in rubber[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2008, 45: 6034-6044.
- [8] Legrain G, Moes N, Verron E. Stress analysis around crack tips in finite strain problems using the extended finite element method[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2005, 63: 290-314.
- [9] Hocine NA, Abdelaziz MN, Mesmacque G. Experimental and numerical investigation on single specimen methods of determination of J in rubber materials[J]. *International Journal of Fracture*, 1998, 94: 321-338.
- [10] Bourdin B, Francfort GA, Marigo JJ. The Variational Approach to Fracture[J]. *Journal of Elasticity*, 2008, 91: 5-148.
- [11] Duda FP, Ciaronetti A, Sánchez PJ, Huespe AE. A phase-field/gradient damage model for brittle fracture in elastic-plastic solids[J]. *International Journal of Plasticity*, 2015, 65: 269-296.
- [12] Ha YD, Bobaru F. Studies of dynamic crack propagation and crack branching with peridynamics[J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 162: 229-244.
- [13] Wu J-Y, Nguyen VP, Nguyen CT, Sutula D, Bordas S, Sinaie S. Phase field modeling of fracture[J]. *Advances in Applied Mechanics: Multi-scale Theory and Computation*, 2018, 52.
- [14] Ambati M, Gerasimov T, De Lorenzis L. A review on phase-field models of brittle fracture and a new fast hybrid formulation[J]. *Computational Mechanics*, 2015, 55: 383-405.
- [15] Miehe C, Welschinger F, Hofacker M. Thermodynamically consistent phase - field models of fracture: Variational principles and multi - field FE implementations[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010, 83: 1273-1311.
- [16] Bourdin B, Larsen CJ, Richardson CL. A time-discrete model for dynamic fracture based on crack

- regularization[J]. *International Journal of Fracture*, 2011, 168: 133-143.
- [17] Bourdin B, Francfort GA, Marigo J-J. Numerical experiments in revisited brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2000, 48: 797-826.
- [18] Bourdin B, Francfort GA, Marigo J-J. The variational approach to fracture[J]. *Journal of Elasticity*, 2008, 91: 5-148.
- [19] Zeng W, Liu G. Smoothed finite element methods (S-FEM): an overview and recent developments[J]. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 2018, 25: 397-435.
- [20] Liu G-R, Trung N. Smoothed finite element methods[M]. CRC press, 2016.
- [21] Liu G, Nguyen T, Dai K, Lam K. Theoretical aspects of the smoothed finite element method (SFEM)[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2007, 71: 902-930.
- [22] Liu G, Dai K, Nguyen TT. A smoothed finite element method for mechanics problems[J]. *Computational Mechanics*, 2007, 39: 859-877.
- [23] Chen JS, Wu CT, Yoon S, You Y. A stabilized conforming nodal integration for Galerkin mesh - free methods[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2001, 50: 435-466.
- [24] Liu G, Nguyen-Thoi T, Nguyen-Xuan H, Lam K. A node-based smoothed finite element method (NS-FEM) for upper bound solutions to solid mechanics problems[J]. *Computers & Structures*, 2009, 87: 14-26.
- [25] Liu GR, Nguyen-Thoi T, Lam KY. An edge-based smoothed finite element method (ES-FEM) for static, free and forced vibration analyses of solids[J]. *Journal of Sound and Vibration*, 2009, 320: 1100-1130.
- [26] Nguyen-Thoi T, Liu G, Vu-Do H, Nguyen-Xuan H. A face-based smoothed finite element method (FS-FEM) for visco-elastoplastic analyses of 3D solids using tetrahedral mesh[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2009, 198: 3479-3498.
- [27] Jiang C, Yao J-Y, Zhang Z-Q, Gao G-J, Liu GR. A sharp-interface immersed smoothed finite element method for interactions between incompressible flows and large deformation solids[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 340: 24-53.
- [28] Lee C-K, Angela Mihai L, Hale JS, Kerfriden P, Bordas SPA. Strain smoothing for compressible and nearly-incompressible finite elasticity[J]. *Computers & Structures*, 2017, 182: 540-555.
- [29] Onishi Y, Iida R, Amaya K. F - bar aided edge - based smoothed finite element method using tetrahedral elements for finite deformation analysis of nearly incompressible solids[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2017, 109: 1582-1606.
- [30] Ong TH, Heaney CE, Lee C-K, Liu GR, Nguyen-Xuan H. On stability, convergence and accuracy of bES-FEM and bFS-FEM for nearly incompressible elasticity[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 285: 315-345.
- [31] Jiang C, Liu GR, Han X, Zhang ZQ, Zeng W. A smoothed finite element method for analysis of anisotropic large deformation of passive rabbit ventricles in diastole[J]. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, 2015, 31: e02697.
- [32] Jiang C, Zhang ZQ, Han X, Liu GR. Selective smoothed finite element methods for extremely large

- deformation of anisotropic incompressible bio-tissues[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2014, 99: 587-610.
- [33] Bhowmick S, Liu GR. A phase-field modeling for brittle fracture and crack propagation based on the cell-based smoothed finite element method[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2018, 204: 369-387.
- [34] Patil RU, Mishra BK, Singh IV. An adaptive multiscale phase field method for brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 329: 254-288.
- [35] Heister T, Wheeler MF, Wick T. A primal-dual active set method and predictor-corrector mesh adaptivity for computing fracture propagation using a phase-field approach[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 290: 466-495.
- [36] Patil R, Mishra B, Singh I, Bui T. A new multiscale phase field method to simulate failure in composites[J]. *Advances in Engineering Software*, 2018, 126: 9-33.
- [37] Tian F, Tang X, Xu T, Yang J, Li L. A hybrid adaptive finite element phase - field method for quasi - static and dynamic brittle fracture[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2019, 120: 1108-1125.
- [38] Badnava H, Msekh MA, Etemadi E, Rabczuk T. An h-adaptive thermo-mechanical phase field model for fracture[J]. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2018, 138: 31-47.
- [39] De Borst R, Crisfield MA, Remmers JJ, Verhoosel CV. *Nonlinear finite element analysis of solids and structures[M]*. John Wiley & Sons, 2012.
- [40] Wriggers P. *Nonlinear finite element methods: Springer Science & Business Media*, 2008.
- [41] Miehe C, Schänzel L-M. Phase field modeling of fracture in rubbery polymers. Part I: Finite elasticity coupled with brittle failure[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 65: 93-113.
- [42] Tanné E, Li T, Bourdin B, Marigo J-J, Maurini C. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 110: 80-99.
- [43] Massy D, Mazen F, Landru D, Mohamed NB, Tardif S, Reinhardt A, Madeira F, Kononchuk O, Rieutord F. Crack Front Interaction with Self-Emitted Acoustic Waves[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121: 195501.
- [44] Miller O, Freund L, Needleman A. Energy dissipation in dynamic fracture of brittle materials[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1999, 7: 573.
- [45] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Energy dissipation in dynamic fracture[J]. *Physical Review Letters*, 1996, 76: 2117.
- [46] Miehe C, Welschinger F, Hofacker M. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: Variational principles and multi-field FE implementations[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2010, 83: 1273-1311.
- [47] Miehe C, Hofacker M, Welschinger F. A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2010, 199: 2765-2778.

- [48] Loew PJ, Peters B, Beex LAA. Rate-dependent phase-field damage modeling of rubber and its experimental parameter identification[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2019, 127: 266-294.
- [49] Zhang YS, Khademhosseini A. Advances in engineering hydrogels[J]. *Science*, 2017, 356: 3627.
- [50] Phadke A, Zhang C, Arman B, Hsu CC, Mashelkar RA, Lele AK, Tauber MJ, Arya G, Varghese S. Rapid self-healing hydrogels[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2012, 109: 4383-4388.
- [51] Chen C-H, Bouchbinder E, Karma A. Instability in dynamic fracture and the failure of the classical theory of cracks[J]. *Nature Physics*, 2017, 13: 1186.
- [52] Zhang F, Huang W, Li X, Zhang S. Moving mesh finite element simulation for phase-field modeling of brittle fracture and convergence of Newton's iteration[J]. *Journal of Computational Physics*, 2018, 356: 127-149.
- [53] Chen L. Mesh Smoothing Schemes Based on Optimal Delaunay Triangulations[C]. IMR: Citeseer; 2004: 109-120.
- [54] Gerasimov T, De Lorenzis L. A line search assisted monolithic approach for phase-field computing of brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 312: 276-303.
- [55] Jie W, McAuliffe C, Waisman H, Deodatis G. Stochastic analysis of polymer composites rupture at large deformations modeled by a phase field method[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering*, 2016, 312: S0045782516305291.
- [56] Miehe C, Schaezel L-M, Ulmer H. Phase field modeling of fracture in multi-physics problems. Part I. Balance of crack surface and failure criteria for brittle crack propagation in thermo-elastic solids[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 294: 449-485.
- [57] Paggi M, Reinoso J. Revisiting the problem of a crack impinging on an interface: A modeling framework for the interaction between the phase field approach for brittle fracture and the interface cohesive zone model[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, 321: 145-172.
- [58] Lee W, Yoo Y-H, Shin H. Reconsideration of crack deflection at planar interfaces in layered systems[J]. *Composites Science and Technology*, 2004, 64: 2415-2423.



## 第 5 章 快速断裂中动力学失稳的相场模拟

### 5.1 引言

快速断裂中高速移动的裂纹由于其动力学多样性,几十年来引起了人们极大的研究兴趣<sup>[1-5]</sup>。当裂纹速度达到一个  $V_{mb} \sim 0.4 V_R$  临界值(瑞利波速,  $V_R$ ),直裂纹首先发生微分支失稳,其特征是在断口处出现受挫的裂纹分枝<sup>[6-8]</sup>。超过阈值  $V_{mb}$  后,动态裂纹将进入一个双稳态区域,其中单个或多个裂纹可以持续存在<sup>[9]</sup>。通过变薄试样来抑制微分支失稳的发生后,在非常大的背景应变下,单个裂纹可以加速接近其理论极限。然而,在一个更高的临界速度  $V_{os} \sim 0.9 V_C$ (剪切波速,  $V_C$ ),一个新的有趣的具有二维属性的裂纹振荡不稳定性开始出现<sup>[10-12]</sup>。如果背景应变进一步增大,与以往低速分岔形成鲜明对比的超高速尖峰分裂不稳定性将在振荡裂纹状态之后或之前出现<sup>[13]</sup>。鉴于如此丰富的动力学行为,弄清其内在规律对基础和应用研究具有双重意义。

迄今为止,在简单裂纹运动的研究方面已经取得了相当大的进展,其中最完备的就是经典的线性弹性断裂力学(LEFM)<sup>[14-16]</sup>。LEFM 本质上是一个无标度理论。该理论不考虑裂纹尖端(“进展区”)具有复杂耗散或非线性变形的小尺度区域<sup>[17]</sup>。然而,最近的实验表明,这种补充尺度对裂纹动力学有显著的影响,特别是对不稳定裂纹<sup>[9]</sup>。因此,一旦一个简单的裂纹状态失去稳定性,例如微分支或振荡,LEFM 就不再有效。可以肯定的是,一个完备的动态裂纹理论框架应该至少包含这个固有的尺度。一个经过验证的弱非线性理论,吸收了非线性长度尺度  $\ell_m$  正是为此而生<sup>[18, 19]</sup>。然而,这个理论本身并不能预测裂纹的路径。前面章节提到的一类相场模型(PFM)<sup>[20-23]</sup>,由于其不需要对尖锐裂纹表面进行跟踪,在处理裂纹分叉等复杂裂纹方面具有良好的应用前景<sup>[24, 25]</sup>。

关于断裂相场的研究基本上涵盖了各种力学响应的材料<sup>[26-29]</sup>,证明了相场法的普适性是毋庸置疑的。然而,据我们所知,几乎所有关于含非线性变形的断裂相场建模的报道都局限于准静态。至少在力学领域,有关相场建模与非线性弹性动力学耦合的研究还非常匮乏。物理学界在这方面已经取得了一些突破,陈和他的同事们<sup>[13, 30]</sup>提出了一种改进的基于物理的 PFM 来填补这一空白。使用大尺度有限差分模拟(高达  $10^7$  的节点),他们首次再现了实验中观察到的裂纹振荡不稳定性。尽管如此,他们展示的模拟结果显然会导致繁重的计算工作。

本章的研究致力于完成超弹性材料断裂中高速裂纹不稳定性的相场建模。我们的经验证实,将脆性断裂下表现优异的力学基相场模型直接扩展到非线性动态断裂是不可行的。受最近基于物理学界的 PFM 的启发<sup>[30]</sup>,一种基于 Griffith 理

论的新型动态 PFM 由能量守恒导出。但是，我们的模拟表明，该模型需要特殊技巧来解决大变形快速断裂中的网格畸变<sup>[31]</sup>。为此，我们开发了一种关键的自适应变形网格去除方案（ADMR）。此外，我们实现了性能出色的多级混合自适应网格算法，以加快计算速度。概述了通过有限元方法（FEM）进行的详细数值实现。之后，通过两个准静态断裂基准来验证模型和内部代码的可靠性。利用新模型和算法的优势，成功地再现了基于经典力学模型的能力之外的超高速裂纹振荡和尖端分裂不稳定性，这与实验观察结果十分吻合<sup>[10,13]</sup>。此外，我们还简要探讨了新模型与常规模型之间的差异。

本章的其余部分组织如下。第 5.2 节为非线性变形系统中速度相关的动态相场模型的能量守恒奠定了坚实的理论基础。根据变分原理导出了强形式的控制方程。在第 5.3 节中，我们概述了使用 FEM 的详细数值实现。其中的关键算法以伪代码的形式进行了说明。5.4 节旨在通过之前报道的两次准静态断裂试验来验证新模型和算法的可靠性。在第 5.5 节中，我们使用预应变断裂配置对所提出的模型和传统模型进行了对比研究。最后，5.6 节总结了本文的主要结论。

## 5.2 大变形动态相场模型

### 5.2.1 扩散裂纹的相场近似

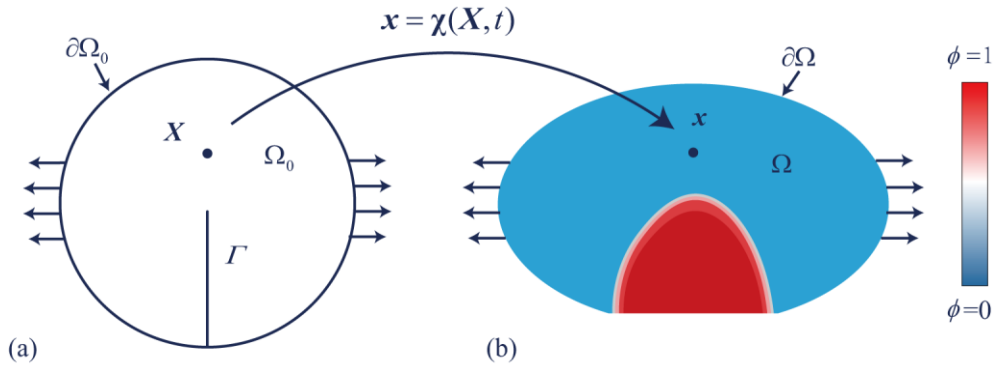


图 5.1 (a) 含内部边界的弹性体的初始构型；(b) 当前构型的裂纹相场近似。

断裂相场建模的关键思想是在有界扩散损伤带内正则化尖锐的裂纹拓扑结构。让我们考虑一个初始构型为  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 2, 3$ ) 由表面  $\partial\Omega \subset \mathbb{R}^{n-1}$  包围的超弹性体，如图 5.1(a)所示。在形变过程中，内部的不连续表面  $\Gamma$  被正则化，通过引入一个辅助的相场损伤变量  $\phi(\mathbf{X}, t) \in [0, 1]$ ，如图 5.1(b)所示。初始构型中的材料点  $\mathbf{X}$  被映射到当前构型中的一个新的位置  $\mathbf{x}$  通过  $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$ 。于是，形变梯度张量可以写为

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{x}}\chi(\mathbf{X}, t) = \mathbf{I} + \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u} \quad (5.1)$$

于是，格林应变张量被定义为

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \quad (5.2)$$

其中  $\mathbf{I}$  是一个二阶单位张量， $\mathbf{u}$  代表位移场。

正如我们前面章节描述的，在变分相场理论的框架下， $\phi = 0$  表示材料的完好状态， $\phi = 1$  表示完全损伤的材料状态。裂纹表面能被正则化通过

$$\Gamma_l(\phi) = \int_{\Gamma} G_c dA \approx \int_{\Omega} G_c \gamma(\phi, \nabla \phi) dV \quad (5.3)$$

从而绕过了繁琐的不连续曲面积分<sup>[23]</sup>。这里， $G_c$  是材料的临界能量释放率， $\gamma$  是裂纹表面密度函数。在第二章中我们提到，此类函数一个有代表性的格式可以表示如下<sup>[32, 33]</sup>

$$\gamma(\phi, \nabla \phi) = \frac{1}{4c_w} \left( \frac{w(\phi)}{l_0} + l_0 |\nabla \phi|^2 \right), \quad c_w = \int_0^1 \sqrt{w(\alpha)} d\alpha \quad (5.4)$$

其中， $l_0$  是一个正则化长度尺度，依赖于固有的材料特征长度  $l_{ch}$ 。特别的，我们考虑如下的 AT1 格式<sup>[34]</sup>

$$\gamma(\phi, \nabla \phi) = \frac{3}{8} \left( \frac{\phi}{l_0} + l_0 |\nabla \phi|^2 \right) \quad (5.5)$$

该模型的特征是可以预测一个无损伤的线弹性阶段。

## 5.2.2 动态断裂的非保守拉格朗日构造

非线性弹性材料如类橡胶聚合物的快速断裂是非保守的。复杂的耗散过程发生在裂纹尖端附近，即裂纹扩展区。除了产生新的裂纹表面，少量的能量以热产生的形式耗散。对于这样一个非保守系统(涉及耗散)，其动态演化遵循包含非保守力的拉格朗日方程的一般形式，即

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\delta L}{\delta \dot{q}} \right) - \frac{\delta L}{\delta q} + \frac{\delta \mathcal{D}}{\delta \dot{q}} = Q^* \quad (5.6)$$

其中， $L = T - \Pi$  是拉格朗日算子，广义变量  $q = (\mathbf{u}, \phi)$ ， $\mathcal{D}$  是一个耗散泛函， $Q^*$  代表非保守力。以上各个组分的具体格式将在随后给出。

(1) **动能项** 受到陈等人工作的启发<sup>[30]</sup>，我们考虑如下格式的动能

$$\mathcal{K} = \frac{\rho_0}{2} \int_{\Omega_0} f(\phi) \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} dV \quad (5.7)$$

其中，

$$\begin{cases} f(\phi) = 1 & (M) \\ f(\phi) = (1 - \phi)^2 + k & (P) \end{cases} \quad (5.8)$$

因此，动能的改变率可以导出为

$$\dot{\mathcal{K}} = \int_{\Omega_0} (\rho_0 f(\phi) \ddot{\mathbf{u}} + \rho_0 \frac{\partial f(\phi)}{\partial t} \dot{\mathbf{u}}) \cdot \dot{\mathbf{u}} dV - \int_{\Omega_0} \left( \frac{\rho_0}{2} \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \right) \dot{\phi} dV \quad (5.9)$$

其中,  $\rho_0$  是初始构型的材料密度,  $\ddot{\mathbf{u}}$  是加速度。出于数值稳定的目的, 一个非负的数  $k$  ( $0 \leq k \ll 1$ ) 被添加。值得注意的是, 模型  $P$  所表示的动能并不是独立于相场损伤变量的, 这与以往的动态相场模型(模型  $M$ )不同, 并且在随后的研究中也发现了上述两种模型的显著差异。

(2) **势能** 从变分相场的观点来看, 总的势能  $\Pi$  可以表示为储存的应变能和裂纹表面能之和, 即

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{u}, \phi) &= \int_{\Omega_0 \setminus \Gamma} \psi(\mathbf{F}) dV + \int_{\Gamma} G_c dA \\ &= \int_{\Omega_0} g(\phi) \psi(\mathbf{F}) dV + \int_{\Omega_0} G_c \gamma(\phi, \nabla \phi) dV \end{aligned} \quad (5.10)$$

其中, 一个单调递减的函数  $g(\phi) = (1 - \phi)^2 + k$  以及  $\phi \in [0, 1]$  被引入以控制储存能量的衰减。对于超弹性材料, 如聚丙烯酰胺凝胶, 我们关注一个经过实验验证的平面应力的 Neo-Hookean 能量泛函<sup>[3, 5]</sup>

$$\psi(\mathbf{F}) = \frac{\mu}{2} [\text{tr}[\mathbf{F}^T \mathbf{F}] + \det(\mathbf{F})^{-2} - 3] \quad (5.11)$$

于是, 势能  $\Pi(\mathbf{u}, \phi)$  对  $\mathbf{u}, \phi$  的变分可以写为

$$\begin{aligned} \delta \Pi(\mathbf{u}, \phi, \delta \mathbf{u}, \delta \phi) &= \int_{\Omega_0} \left( g(\phi) \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} : \nabla \delta \mathbf{u} + \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} \psi(\mathbf{F}) \delta \phi \right) dV \\ &\quad + \int_{\Omega_0} \frac{3}{8} \left( \frac{1}{l_0} \delta \phi + 2l_0 \nabla \phi \cdot \nabla \delta \phi \right) dV \end{aligned} \quad (5.12)$$

通过分部积分, 式 5.12 可以重写为:

$$\begin{aligned} \delta \Pi(\mathbf{u}, \phi, \delta \mathbf{u}, \delta \phi) &= - \int_{\Omega_0} (\nabla_x \cdot \mathbf{P}) \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{\partial \Omega_0} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{n}) \cdot \delta \mathbf{u} dA \\ &\quad + \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} \psi(\mathbf{F}) + \frac{3}{8} \left( \frac{G_c}{l_0} - 2G_c l_0 \nabla^2 \phi \right) \right) \delta \phi dV \\ &\quad + \int_{\partial \Omega_0} \frac{3}{4} G_c l_0 \nabla_x \phi \cdot \mathbf{n}_0 \delta \phi dA \end{aligned} \quad (5.13)$$

其中, PK1 应力定义为

$$\mathbf{P} = g(\phi) \frac{\partial \psi(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} = ((1 - \phi)^2 + k) \mu [\mathbf{F} - \det(\mathbf{F})^{-2} \mathbf{F}^{-T}] \quad (5.14)$$

为了便于数值实施, 我们也导出了 PK2 应力

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{P} = ((1 - \phi)^2 + k) \mu (\mathbf{I} - J^{-2} \mathbf{C}^{-1}) \quad (5.15)$$

以及四阶弹性张量

$$\mathbb{C}^{SE} = 2 \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{C}} = ((1-\phi)^2 + k) (\mu J^{-2} [\mathbf{C}_{il}^{-1} \mathbf{C}_{kj}^{-1} + \mathbf{C}_{ik}^{-1} \mathbf{C}_{jl}^{-1}] + 2\mu J^{-2} \mathbf{C}_{ij}^{-1} \mathbf{C}_{kl}^{-1}) \quad (5.16)$$

其中，右柯西-格林张量  $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$  以及雅各比行列式  $J = \det(\mathbf{F})$ 。

(3) **耗散能** 为了处理非保守问题，我们也引入了一个由于裂纹生长导致的粘性耗散速率  $\dot{\mathcal{D}}$ ，其为

$$\dot{\mathcal{D}} = \frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \eta \dot{\phi}^2 dV \quad (5.17)$$

其中， $\eta \geq 0$  (unit:  $\text{Nm}^{-2} \cdot \text{s}$ ) 是导致速率依赖的粘性系数。式 5.17 的引入不仅明确满足了热力学第二定律，还提高了数值计算的鲁棒性。

#### (4) 外功率

一般情况下，外功率  $\dot{\mathcal{P}}^{ext}$  可以直接写为：

$$\dot{\mathcal{P}}^{ext} = \int_{\Omega} \bar{\mathbf{b}}_0 \cdot \dot{\mathbf{u}} dV + \int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{t}}_0 \cdot \dot{\mathbf{u}} dA \quad (5.18)$$

其中， $\bar{\mathbf{b}}_0$  和  $\bar{\mathbf{t}}_0$  分别是体力和牵引力矢量。式 5.18 的变分为

$$\delta \mathcal{P}^{ext} = \int_{\Omega} \bar{\mathbf{b}}_0 \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{\partial\Omega} \bar{\mathbf{t}}_0 \cdot \delta \mathbf{u} dA \quad (5.19)$$

其对应于非保守力。

### 5.2.3 控制方程

考虑到  $\delta \mathbf{u}$  和  $\delta \phi$  的独立性，我们可以导出如下的平衡方程

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} \left( \rho_0 f(\phi) \ddot{\mathbf{u}} + \rho_0 \frac{\partial f(\phi)}{\partial t} \dot{\mathbf{u}} - \nabla_x \cdot \mathbf{P} - \bar{\mathbf{b}}_0 \right) \cdot \delta \mathbf{u} dV \\ & + \int_{\partial\Omega_0} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{n} - \bar{\mathbf{t}}_0) \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \end{aligned} \quad (5.20)$$

以及

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_0} \left( \frac{\partial g(\phi)}{\partial \phi} \psi(\mathbf{F}) + \frac{3}{8} \left( \frac{G_c}{l_0} - 2G_c l_0 \nabla^2 \phi \right) + \eta \dot{\phi} - \frac{\rho_0}{2} \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \right) \delta \phi dV \\ & + \int_{\partial\Omega_0} \frac{3}{4} G_c l_0 \nabla_x \phi \cdot \mathbf{n}_0 \delta \phi dA = 0 \end{aligned} \quad (5.21)$$

这可以推导出如下的控制方程

$$\begin{cases} \rho_0 f(\phi) \ddot{\mathbf{u}} + \rho_0 \frac{\partial f(\phi)}{\partial t} \dot{\mathbf{u}} = \nabla_x \cdot \mathbf{P} + \bar{\mathbf{b}}_0 \\ \frac{3}{8} \left( \frac{G_c}{l_0} - 2G_c l_0 \nabla^2 \phi \right) + \eta \dot{\phi} - \frac{\rho_0}{2} \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} = 2(1-\phi) \psi(\mathbf{F}) \\ \mathbf{P} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}}_0 & \text{at } \partial\Omega_0 \\ \nabla_x \phi \cdot \mathbf{n}_0 = 0 & \text{at } \partial\Omega_0 \end{cases} \quad (5.22)$$

其中， $f(\phi)$  有几种可替代格式，不过，本章的工作只考虑方程 5.8 中的两种，即，模型  $P$  和  $M$ 。

## 5.3 数值实施

### 5.3.1 弱形式

方程 5.21 中给出的控制方程可以通过有限元方法 (FEM) 进行数值求解。按照标准的伽辽金加权余量法, 力学响应的控制方程的弱形式可以写为

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_u = & \int_{\Omega_0} (\rho_0 f(\phi) \dot{\mathbf{u}} + \rho_0 \frac{\partial f(\phi)}{\partial t} \dot{\mathbf{u}}) \cdot \delta \mathbf{u} dV \\ & + \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_x \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Omega_0} \bar{\mathbf{b}} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Gamma_N} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \end{aligned} \quad (5.23)$$

同样的, 相场演化控制方程的弱形式可以导出为

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_\phi = & \int_{\Omega_0} \left( \frac{3}{4} G_c l_0 \nabla_x \phi \cdot \nabla_x \delta \phi + \frac{3}{8} \frac{G_c}{l_0} \delta \phi + \eta \dot{\phi} \delta \phi \right) dV \\ & - \int_{\Omega_0} 2(1-\phi) \psi(\mathbf{F}) \delta \phi dV - \int_{\Omega_0} \frac{\rho_0}{2} \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} \delta \phi dV = 0 \end{aligned} \quad (5.24)$$

这里,  $\delta \mathbf{u}$  和  $\delta \phi$  是试函数。

考虑到后面例子中所涉及的准静态断裂问题, 由公式 5.22 和 5.23 简化的相应的弱形式为

$$\begin{cases} \mathbf{R}_u^s = \int_{\Omega_0} \mathbf{P} : \nabla_x \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Omega_0} \bar{\mathbf{b}} \cdot \delta \mathbf{u} dV - \int_{\Gamma_N} \bar{\mathbf{t}} \cdot \delta \mathbf{u} dA = 0 \\ \mathbf{R}_\phi^s = \int_{\Omega_0} -2(1-\phi) \psi(\mathbf{F}) \delta \phi dV + \int_{\Omega_0} \left( \frac{3}{8} \frac{G_c}{l_0} (l_0^2 \nabla_x \phi \cdot \nabla_x \delta \phi + \delta \phi) + \eta \dot{\phi} \delta \phi \right) dV = 0 \end{cases} \quad (5.25)$$

其中函数  $f(\phi)$  在方程 5.24 中消失, 意味着模型 P 和 M 在准静态条件下是完全一致的。

### 5.3.2 空间和时间离散

正如前面所提及的, 经典的 FEM 被用于离散基本的场变量  $\mathbf{u}$ ,  $\phi$  以及它们的梯度在空间中, 可以得到

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{N}_i^u \mathbf{u}_i, \quad \phi = \sum_{i=1}^m N_i \phi_i, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{B}_i^u \mathbf{u}_i, \quad \nabla \phi = \sum_{i=1}^m \mathbf{B}_i^\phi \phi_i \quad (5.26)$$

以及

$$\mathbf{N}_i^u = \begin{bmatrix} N_i & 0 \\ 0 & N_i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_i^u = \begin{bmatrix} N_{i,x} & 0 \\ 0 & N_{i,y} \\ N_{i,y} & N_{i,x} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_i^\phi = \begin{bmatrix} N_{i,x} \\ N_{i,y} \end{bmatrix} \quad (5.27)$$

其中,  $N_i$  和  $m$  分别表示 T3/Q4 单元的形函数及其节点数量。

对于动力学问题所需的时间离散, 一个显式的 velocity-Verlet 时间积分算法<sup>[35]</sup>定义如下

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \dot{\mathbf{u}}_n \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{\mathbf{u}}_n \Delta t^2 \\ \dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{\ddot{\mathbf{u}}_n + \ddot{\mathbf{u}}_{n+1}}{2} \Delta t \end{cases} \quad (5.28)$$

其中，时间步长  $\Delta t$  由 CFL 条件限制<sup>[36]</sup>，定义为

$$\Delta t < \Delta t_{CFL} = h_{\min} / V_R \quad (5.29)$$

其中， $h_{\min}$  为最小的单元尺度， $V_R$  为材料的瑞利波速。注意， $h_{\min}$  可能会急剧减小随着形变的加剧。为此，我们选择了一个相当小的时间增量，大约  $0.01\Delta t_{CFL}$ 。

此外，对于耗散项，我们采取一个向后的欧拉差分方法

$$\dot{\phi} = \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t} \quad (5.30)$$

其中， $\phi_n$  ( $\phi_{n+1}$ ) 代表在时刻  $t_n$  ( $t_{n+1}$ ) 的损伤相场值。

### 5.3.3 线性化

让我们从准静态情况开始。采用牛顿-拉普森方法来线性化方程 5.24，我们可以得到

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\mathbf{uu}}^s & \mathbf{K}_{\mathbf{u}\phi}^s \\ \mathbf{K}_{\phi\mathbf{u}}^s & \mathbf{K}_{\phi\phi}^s \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \phi \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_{\mathbf{u}}^s \\ \mathbf{f}_{\phi}^s \end{Bmatrix} \quad (5.31)$$

结合上一小节所给出的离散化，残余矢量  $\mathbf{f}_{\mathbf{u}}^s$  和  $\mathbf{f}_{\phi}^s$  可以写为

$$\begin{cases} \mathbf{f}_{\mathbf{u}}^s = -\int_{\Omega_0} \mathbf{B}_X^T \{\mathbf{S}\} dV + \int_{\Omega_0} N \bar{\mathbf{b}} dV + \int_{\Gamma_N} N \bar{\mathbf{t}} dA \\ \mathbf{f}_{\phi}^s = \int_{\Omega_0} \left[ 2N_{\phi} \psi(\mathbf{F})(1 - \phi_{n+1}) - \frac{3}{4} \mathbf{B}_{\phi}^T G_c l_0 \mathbf{B}_{\phi} \phi_{n+1} - \frac{3}{8} l_0 N_{\phi} - \frac{\eta}{\Delta t} N_{\phi} (\phi_{n+1} - \phi_n) \right] dV \end{cases} \quad (5.32)$$

其中的切线刚度矩阵  $\mathbf{K}_{\mathbf{uu}}^s$ ,  $\mathbf{K}_{\mathbf{u}\phi}^s$ ,  $\mathbf{K}_{\phi\mathbf{u}}^s$  和  $\mathbf{K}_{\phi\phi}^s$  可以给出为

$$\begin{cases} \mathbf{K}_{\mathbf{uu}}^s = \frac{\partial R_{\mathbf{u}}^s}{\partial \mathbf{u}} = \int_{\Omega_0} \mathbf{B}_X^T \mathbb{C} \mathbf{B}_X dV + \int_{\Omega_k} \mathcal{B}^T \tilde{\mathbf{S}} \mathcal{B} dV \\ \mathbf{K}_{\mathbf{u}\phi}^s = \frac{\partial R_{\mathbf{u}}^s}{\partial \phi} = \int_{\Omega_0} \mathbf{B}_X^T \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \phi} N_{\phi} dV \\ \mathbf{K}_{\phi\mathbf{u}}^s = \frac{\partial R_{\mathbf{u}}^s}{\partial \phi} = \int_{\Omega_0} N_{\phi}^T \left[ \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \phi} \right]^T \mathbf{B}_X dV \\ \mathbf{K}_{\phi\phi}^s = \int_{\Omega_0} \left[ 2N_{\phi} \psi(\mathbf{F}) N_{\phi}^T + \frac{3}{4} \mathbf{B}_{\phi}^T G_c l_0 \mathbf{B}_{\phi} + \frac{\eta}{\Delta t} N_{\phi} N_{\phi}^T \right] dV \end{cases} \quad (5.33)$$

其中， $\mathbf{B}_X$  和  $\mathcal{B}$  为梯度矩阵，其定义为：

$$\mathbf{B}_0 = \begin{bmatrix} N_{i,x} F_{11} & N_{i,x} F_{21} \\ N_{i,y} F_{12} & N_{i,y} F_{12} \\ N_{i,x} F_{12} + N_{i,y} F_{11} & N_{i,x} F_{22} + N_{i,y} F_{21} \end{bmatrix}, \mathbf{B} = \begin{bmatrix} N_{i,x} & \mathbf{0} \\ N_{i,y} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & N_{i,x} \\ \mathbf{0} & N_{i,y} \end{bmatrix} \quad (5.34)$$

注意，一般情况下，方程 5.30 的整体求解是一个棘手的任务，因此，一个稳健的 staggered 算法被采用，其可以得到

$$\begin{cases} \mathbf{K}_{\mathbf{u}}^s \cdot \Delta \mathbf{u} = \mathbf{f}_{\mathbf{u}}^s \\ \mathbf{K}_{\phi}^s \cdot \Delta \phi = \mathbf{f}_{\phi}^s \end{cases} \quad (5.35)$$

得益于位移和相场的解耦，该策略在小的加载步情况下是非常稳定的。

对于存在非线性形变的动态断裂，运动方程的弱形式经过离散后可以写为

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} = \mathbf{f}_{\text{ext}} - \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \phi) \quad (5.36)$$

其中， $\mathbf{M} = \int_{\Omega_0} \rho_0 f(\phi) \mathbf{N} \mathbf{N}^T dV$  为一致性质量矩阵， $\mathbf{f}_{\text{ext}}$  为外部力矢量。 $\mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{u}, \phi)$  为内部力矢量，其可以显式的给出为

$$\mathbf{f}_{\text{int}} = \int_{\Omega_0} \mathbf{B}_X^T \{\mathbf{S}\} dV + \int_{\Omega_0} N \rho_0 \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t} \dot{\mathbf{u}} dV \quad (5.37)$$

类似的，动态的损伤演化格式可以导出为

$$\mathbf{K}_{\phi\phi} \cdot \Delta \phi = \mathbf{f}_{\phi} \quad (5.38)$$

其中，刚度矩阵为

$$\mathbf{K}_{\phi\phi} = \int_{\Omega_0} \left( 2N_{\phi} \psi(\mathbf{F}) N_{\phi}^T + \frac{3}{4} \mathbf{B}_{\phi}^T G_c l_0 \mathbf{B}_{\phi} + \frac{\eta}{\Delta t} N_{\phi} N_{\phi}^T - \frac{\rho_0}{2} \frac{\partial^2 f(\phi)}{\partial \phi^2} \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} N_{\phi} N_{\phi}^T \right) dV \quad (5.39)$$

残余矢量为

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\phi} = & \int_{\Omega_0} \left( 2N_{\phi} \psi(\mathbf{F})(1 - \phi_{n+1}) - \frac{3}{4} \mathbf{B}_{\phi}^T G_c l_0 \mathbf{B}_{\phi} \phi_{n+1} - \frac{3}{8} l_0 N_{\phi} \right) dV \\ & - \int_{\Omega_0} \frac{\eta}{\Delta t} N_{\phi} (\phi_{n+1} - \phi_n) dV + \int_{\Omega_0} N_{\phi} \frac{\rho_0}{2} \frac{\partial f(\phi)}{\partial \phi} \dot{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} dV \end{aligned} \quad (5.40)$$

### 5.3.4 不可逆约束

如前所述，断裂的不可逆性(非愈合性)是通过如下约束不等式来强制执行的

$$\dot{\phi} = \frac{\phi_{n+1} - \phi_n}{\Delta t} \geq 0 \quad (5.41)$$

为实现这个目的，一个名为激活集的方法被采用。按照相场增量  $\Delta \phi$  的正负，我们将损伤演化控制方程分成一个激活集  $\mathcal{A} = \{i | \Delta \phi < 0\}$  及其补集  $\mathcal{A}' = \{i | \Delta \phi \geq 0\}$ 。在每一个迭代步，我们只处理如下的缩减系统

$$\Delta \phi_{\mathcal{A}'} = -(\mathbf{K}_{\phi})_{\mathcal{A}'\mathcal{A}'}^{-1} (\mathbf{f}_{\phi})_{\mathcal{A}'} \quad (5.42)$$

同时设置  $\Delta \phi_{\mathcal{A}} = 0$ 。激活集  $\mathcal{A}$  将持续的更新直到全局约束完成。详细的操作流程



如下伪码所示:

---



---

**Algorithm 1** 激活集算法

---

1.  $\mathcal{A} = \emptyset, \mathcal{A}' = \cup$
  2. while  $\min(\Delta\phi_{\mathcal{A}'} < 0$  do
  3.    $\mathcal{A} = \mathcal{A} \cup (\Delta\phi_{\mathcal{A}'} < 0)$
  4.    $\mathcal{A}' = \cup \setminus \mathcal{A}$
  5.    $\Delta\phi_{\mathcal{A}'}^{n+1} = -(\mathbf{K}_{\phi}^{n+1})_{\mathcal{A}'\mathcal{A}'}^{-1} (\mathbf{f}_{\phi}^{n+1})_{\mathcal{A}'}$
  6.    $\Delta\phi_{\mathcal{A}} = 0$
  7. end
  8.  $\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta\phi^{n+1}$
- 

### 5.3.5 多级混合自适应网格

由于裂纹传播路径的非全局性,自适应网格是一种受欢迎的方案。我们在有限应变框架内毫不费力地实现了我们先前工作中提出的用于脆性断裂的多级混合自适应网格策略。简而言之,该方法利用了单元级别取决于损坏变量的多级混合元素来离散整个求解域,从而消除了悬挂节点并确保裂纹尖端附近网格的高度各向同性。几种代表性的准静态和动态断裂基准已经证明了所提出策略的优越性能。具体算法可参考第二章。

### 5.3.6 自适应畸变网格移除策略

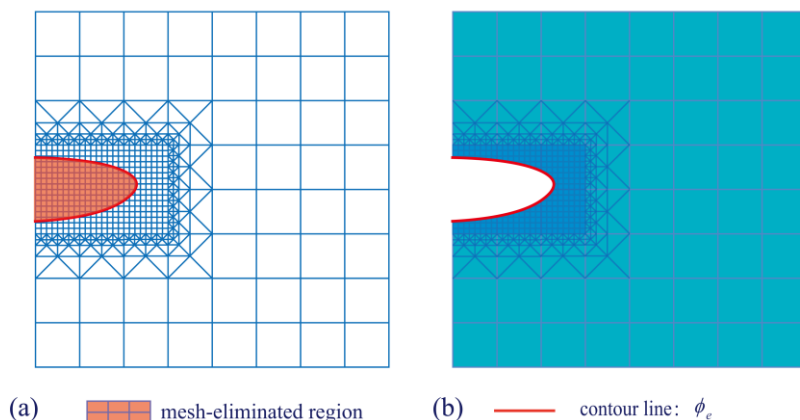


图 5.2 自适应变形网格去除方案的说明。

在大变形条件下,采用有限元法对断裂进行相场建模容易出现网格畸变,特别是动力学方面的快速断裂。为了从根本上解决这一问题,我们提出了一种新的自适应畸变网格去除方案(ADMR)。这一思想源于相场变量所描述的裂纹路径总

是在  $\phi \geq \phi_e$  处出现网格畸变。如图 5.2 (a) 所示, 位于网格消除区域的单元被标记。根据我们的经验,  $\phi_e \approx 0.98$  可以包含所有的畸变单元, 在移除所有标记单元之后, 裂纹的张开轮廓被可视化为图 5.2 (b)。尽管该策略会造成轻微的质量损失, 但是其被证实可以成功的再现大变形的急速断裂, 而且符合物理实际, 即裂纹经过的区域对体系没有贡献。此外, 在我们的模拟种观测到的裂纹模式与实验匹配的相当好。考虑到该方案在整个过程中的关键作用, Algorithm 2 给出了详细的流程。

---



---

#### Algorithm 2 ADMR 算法

---

1. 定义时间步  $n$ , 时间间隔  $n_i$ , 总的单元节点数  $m$
  2. If  $n/n_i = k$  ( $k = 1, 2, 3, \dots$ )
  3. For element  $j$  do
  4. If  $\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \phi_i \geq \phi_e$
  5. 删除 element  $j$  的所有信息
  6. 重构  $Node_n$ ,  $Element_n$ ,  $\mathbf{u}_n$ ,  $\dot{\mathbf{u}}_n$ ,  $\ddot{\mathbf{u}}_n$  以及  $\phi_n$
  7. End if
  8. End
  9. End if
  10. 重新识别边界单元和节点
- 
- 

### 5.3.7 预应变断裂的求解流程

本研究主要关注准静态和预应变动态断裂。前者是简单明了的, 我们不打算重申。至于预应变的动态断裂, 其想法来源于之前的实验配置<sup>[37,38]</sup>。我们首先拉伸一个足够薄且完整的标本, 直到达到想要的应变状态。在保持应变状态的情况下, 用锋利的刀片在一侧边缘中间形成切口。然后, 种子裂纹迅速扩大, 并以高速传播, 直到样品彻底破裂。从断裂的相场方法来看, 类似于实验的思想可以通过以下数学步骤来模拟。

---



---

#### 预应变断裂的相场途径

---

1. 采用 T3 单元离散化, 单元级别  $E_{Level} = 0$ 。
  2. 定义材料参数, 积分参数, 初始相场  $\phi_0$ , 位移场  $\mathbf{u}_0$ 。
  3. 执行准静态加载直到指定的应变状态。
  4. 创建种子裂纹通过强制迪利克雷边界条件  $\phi_c = 1$ ;
  5. 初始化速度场  $\dot{\mathbf{u}}_0$ , 加速度场  $\ddot{\mathbf{u}}_0$ 。
  6. 对于每一个时间步  $[t_n, t_{n+1}]$ , 执行
- 
-

- 6.1. 更新  $\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \dot{\mathbf{u}}_n \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{\mathbf{u}}_n \Delta t^2$ 。
- 6.2. while  $Res \geq tol$  do
  - 组装刚度矩阵  $\mathbf{K}_{\phi\phi}$  和残余矢量  $\mathbf{f}_{\phi}$ 。
  - 更新  $\phi_{n+1}$  根据算法 1。
  - 定义  $Res = \frac{\|\mathbf{f}_{\phi}^{i+1}\|}{\|\mathbf{f}_{\phi}^i\|}$  以及 Euclidean 范数  $\|\cdot\|$ 。
- End
- 6.3. 得到几种质量刚度矩阵  $\mathbf{M}_{n+1}$ , 力矢量  $\mathbf{f}_{n+1}$ 。
- 6.4. 计算加速度  $\ddot{\mathbf{u}}_{n+1} = \mathbf{M}_{n+1}^{-1} \mathbf{f}_{n+1}$ 。
- 6.5. 更新速度  $\dot{\mathbf{u}}_{n+1} = \dot{\mathbf{u}}_n + \frac{1}{2} \Delta t (\ddot{\mathbf{u}}_{n+1} + \ddot{\mathbf{u}}_n)$ 。
- 6.6. 运行自适应网格模块 (算法 2)。
- 6.7. 运行 ADMR 模块 (算法 3)。
- 6.8. 转换多级 T3 单元到 Q4 单元。
- 6.9. 重新确定边界条件。
7. 进入下一个时间步并重复流程 6 (6.1-6.9)。
8. 数据处理以及可视化。

## 5.4 准静态测试验证

在本小节中, 我们首先重新测试了两个先前报道的准静态断裂问题, 即非对称的双边切口拉伸和多裂纹拉伸测试, 以证明内部代码和算法的有效性。

### 5.4.1 非对称双侧切口拉伸测试

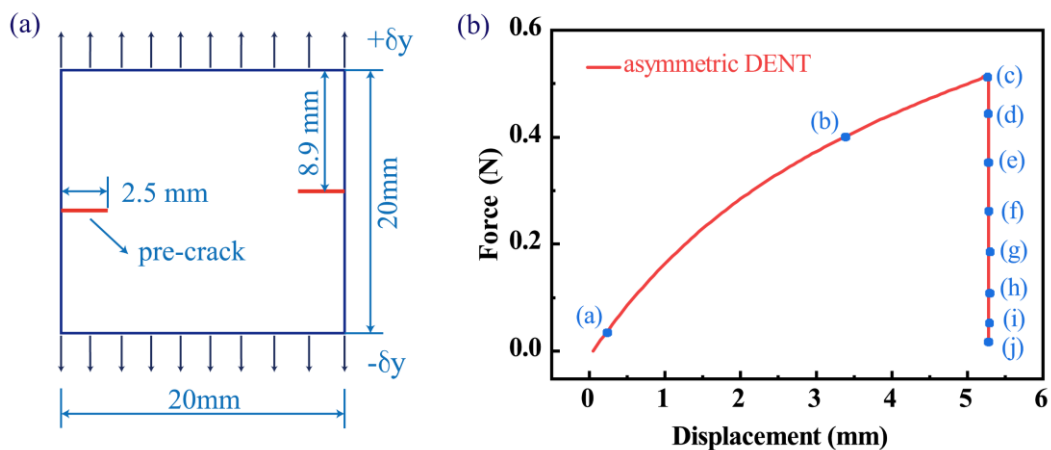


图 5.3 不对称双侧切口拉伸试验。(a)初始几何和边界条件示意图; (b)力-位移曲线。

在本例中，我们考虑了双侧不对称缺口的片状凝胶试样在 Mode-I 加载下的准静态断裂。初始的几何和边界条件与文献报道一致<sup>[39]</sup>，如图 5.3(a)所示。参考 Fineberg 等人的工作，所需的材料参数被设置为  $\mu = 0.0352 \text{ N/mm}^2$  以及  $G_c = 0.025 \text{ N/mm}$ 。由相场理论所引入的正则化参数被设置为  $l_0 = 0.125 \text{ mm}$ ，其约束网格尺度通过  $h \sim l_0/8$ 。出于数值稳定的考虑，粘度系数设置为  $\eta = 1 \times 10^{-3}$ ，且自适应的加载步长也被采用。与之对应的位移-载荷曲线在图 5.3(b)给出。随后，我们从 5.3 (b)中选择几个由点(a-j)表示的加载状态来显示其裂纹模式的快照。裂纹张开轮廓的可视化技术通过消除当前构型中  $\phi > 0.8$  的连续介质来实现。在经过后处理之后，裂纹的形貌包含纯弹性相，裂纹萌生，生长以及最终的完全断裂如图 5.4 所示。整个演化流程与毛等人<sup>[39]</sup>的报道非常相似。

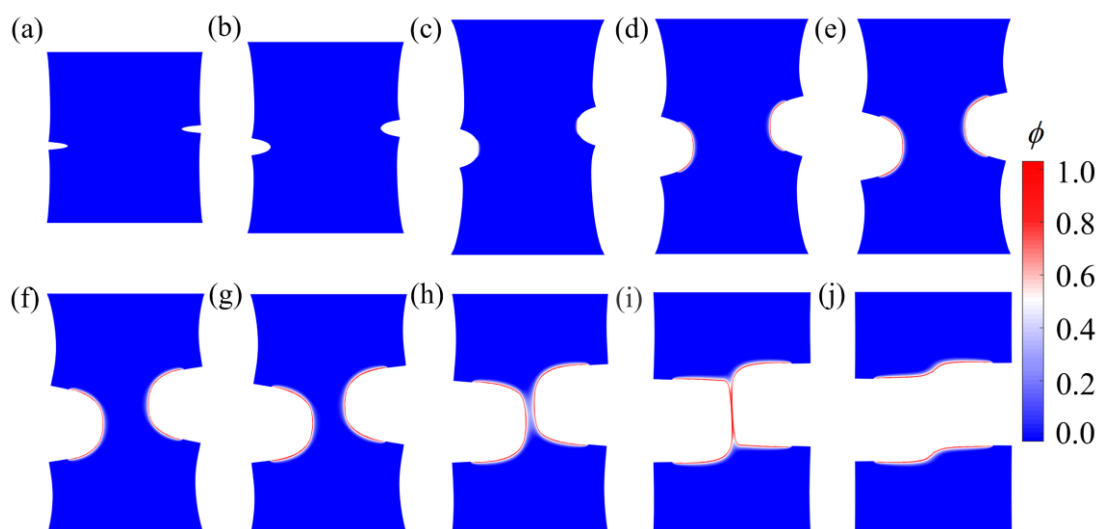


图 5.4 用相场变量的等值线图来描述带有裂纹张开轮廓的变形几何的快照。

#### 5.4.2 多裂纹拉伸测试

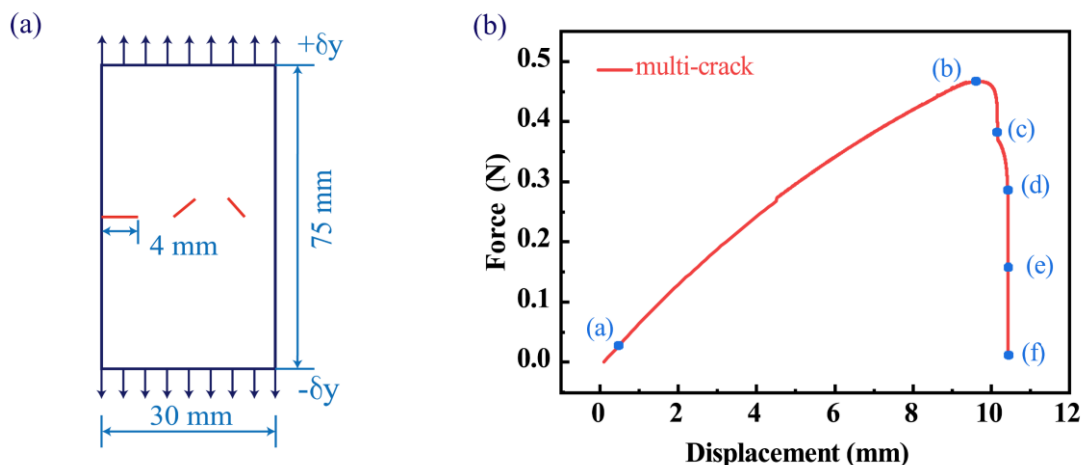


图 5.5 (a) 多裂纹拉伸试验的初始几何形状和边界条件；(b) 本例的力-位移曲线。

该测试涉及多个裂纹的合并，其结构来自于以前的实验和 Loew 等人的模拟<sup>[40]</sup>。图 5.5(a)展示了包含三个预断裂的初始几何形状和施加的边界条件。为了简单起见，我们使用了与前面试验完全一致的本构模型和材料参数。正则化的参数被设置为  $l_0 = 0.25 \text{ mm}$ 。靠近裂纹路线的网格尺寸设置为  $l_0/4$ 。与上一个算例一样。力-位移曲线如图 5.5(b)所示。随后，裂纹在加载  $\delta y = 0.5 \text{ mm}$ ， $\delta y = 9.6463 \text{ mm}$ ， $\delta y = 10.1593 \text{ mm}$ ， $\delta y = 10.4206 \text{ mm}$ ， $\delta y = 10.4301 \text{ mm}$  以及  $\delta y = 10.4302 \text{ mm}$  状态的形貌被展示在图 5.6 中，对应图 5.5(b)中的 a-f。首先，试样会经历无损伤的纯弹性阶段，如图 5.6(a)，当加载达到  $\delta y \sim 9.6463 \text{ mm}$  (点 b)，裂纹从边缘启动。继续拉伸试样，裂纹逐渐融合并完全断裂。注意到，所采用的材料模型与实验并不完全一样，从而导致了更大的形变。但是，整个裂纹的演化模式与实验和之前的模拟符合的很好<sup>[40]</sup>。

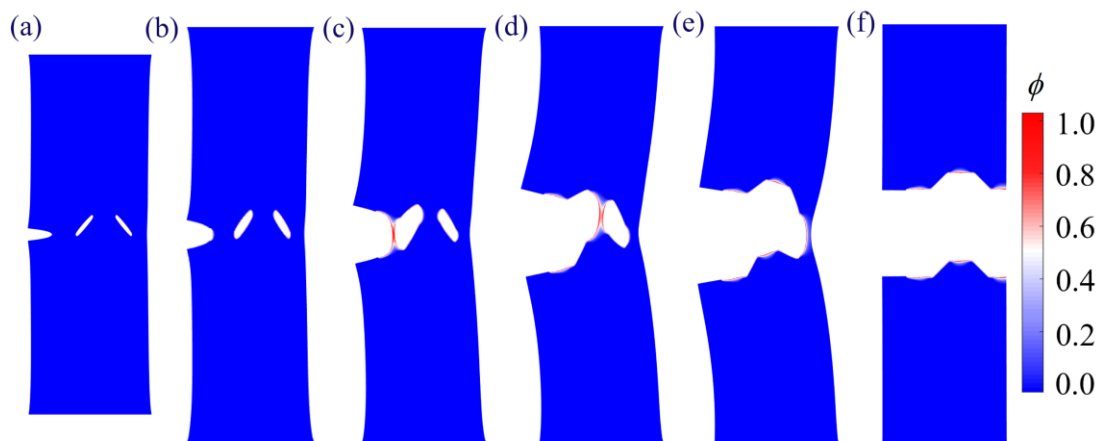


图 5.6 含多条裂纹板的拉伸测试的裂纹模式。

## 5.5 动态断裂不稳定

在验证了算法和代码的可靠性之后，我们进一步研究了超弹性凝胶动态断裂失稳的相场模型。在本小节中，给出了基于  $M$  模型和  $P$  模型的模拟结果，并与实验结果进行了比较。

### 5.5.1 预应变断裂配置

如前所述，本研究的重点是预应变凝胶的断裂，这已经在实验中得到了广泛的研究。我们考虑一个完好的长 72mm，宽 36mm 的矩形板，如图 5.7(a)所示。固定的位移载荷  $\pm \delta y$  被施加在上下边缘以保持系统总的应变能不变，如图 5.7(b)所示。维持这一应变状态，一个 7.2 mm 的种子裂纹被创建通过强制节点相场值为 1，然后动态断裂将被立即触发。根据前人的研究成果，选择凝胶的材料参数

为  $\rho = 1290 \text{ Kg/m}^3$ ,  $\mu = 168 \times 10^3 \text{ Pa}$ ,  $G_c = 9.6 \text{ J/m}^2$ ,  $l_0 = 1.5 \times 10^{-4} \text{ m}$ 。固有的剪切波速为  $V_s = \sqrt{\mu/\rho} \sim 11.4 \text{ m/s}$ 。值得注意的是, 上述 ADMR 算法对于该仿真的顺利实现是必不可少的。

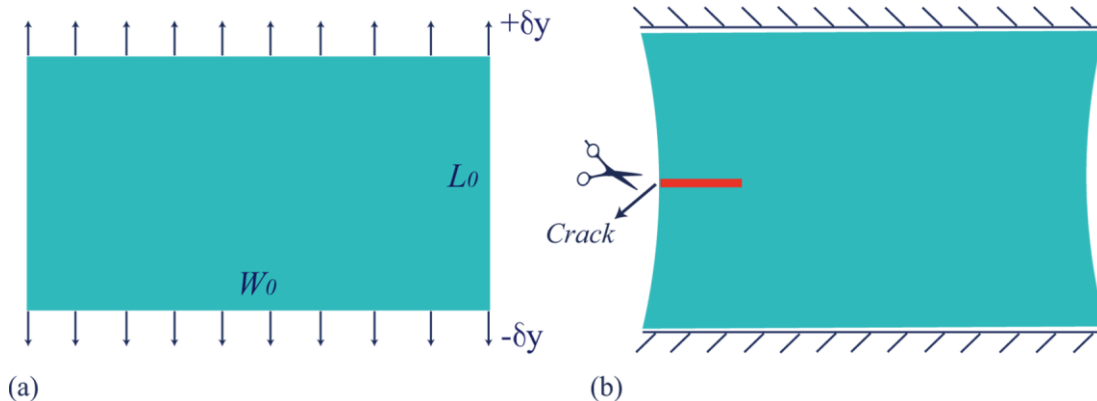


图 5.7 初始(a)和预应变状态(b)的几何示意图和边界条件。

### 5.5.2 经典模型的失效

考虑到线性弹性断裂经典动态相场模型的优点<sup>[41, 42]</sup>, 我们很自然地将其推广到非线性系统, 即第 5.2.1 小节的  $M$  模型。利用该模型以及上一小节给出的材料参数, 我们进行了一系列的预应变状态为  $\epsilon_{yy} = 3.9\%$ ,  $\epsilon_{yy} = 4.4\%$ ,  $\epsilon_{yy} = 5\%$ , and  $\epsilon_{yy} = 5.6\%$  的动态断裂。对于比较低的应变状态比如  $\epsilon_{yy} = 3.9\%$ , 一个直的裂纹传播路径被追踪到, 在四个不连续渐近时刻的裂纹模式如图 5.8(a)所示。为了显示裂纹的张开轮廓, 当前构型下网格满足相场值  $\phi > 0.5$  的部分被隐藏<sup>[30]</sup>。随着预拉伸背景应变的逐渐增大, 简单的直裂纹失稳, 如图 5.8(b)所示。一条简单的直裂纹几乎对称地分成两支, 其预应变为  $\epsilon_{yy} = 5.6\%$ 。这种现象在超弹性凝胶的断裂中并不罕见。然而, 不幸的是, 在实验中观察到的理想的裂纹振荡不稳定性不能在任何预应变状态下再现<sup>[9]</sup>。

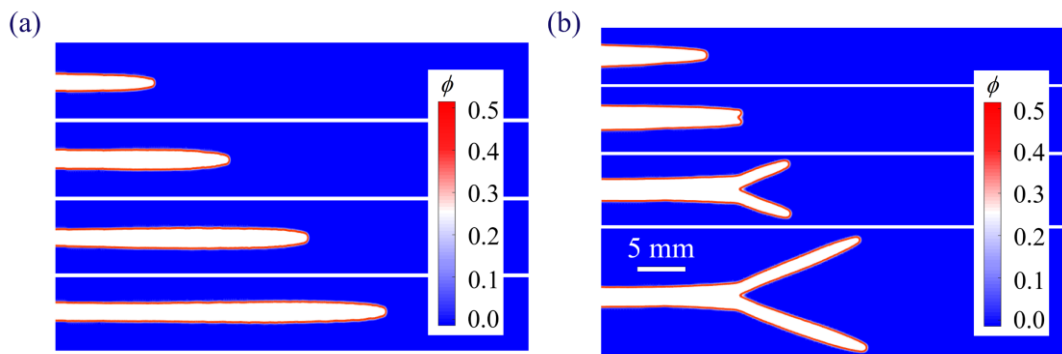


图 5.8 由经典模型所计算的在预应变分别为  $\epsilon_{yy} = 3.9\%$  (a)和  $\epsilon_{yy} = 5.6\%$  (b)的裂纹模式。

经过许多徒劳的努力，我们对模型  $M$  在非线性弹性框架下处理动态断裂的能力表示怀疑。为了查明真相，我们通过跟踪相场轮廓  $\phi = 0.5$  的推进来测量裂纹的扩展速度。基于非均匀自适应网格，通过简单的 MATLAB 代码实现了相场轮廓的二维散点插值。裂纹尖端在一个时间步长  $[t_n, t_{n+1}]$  的移动距离可以通过  $\Delta l = \sqrt{(x_{n+1} - x_n)^2 + (y_{n+1} - y_n)^2}$  计算，从而裂纹的传播速度可以表示为

$$V_c = \frac{\Delta l}{t_{n+1} - t_n} \quad (5.43)$$

为使计算结果具有可比性，用剪切波速  $V_s$  对断裂速度进行归一化，如图 5.9 所示。裂纹速度总是先经历一个短暂的加速度，然后进入一个平台。随着预应变加载的增加，裂纹扩展速度平台略有抬升。而瞬态裂纹扩展速度峰值约为  $0.63 V_s$ ，远低于实验测得  $0.9 V_s$ 。考虑到基于模型  $M$  的预测与实验测量之间的严重冲突，我们推测经典的动态断裂模型不能用于非线性系统的断裂预测。同时，对经典的动态断裂模型的修正也迫在眉睫。

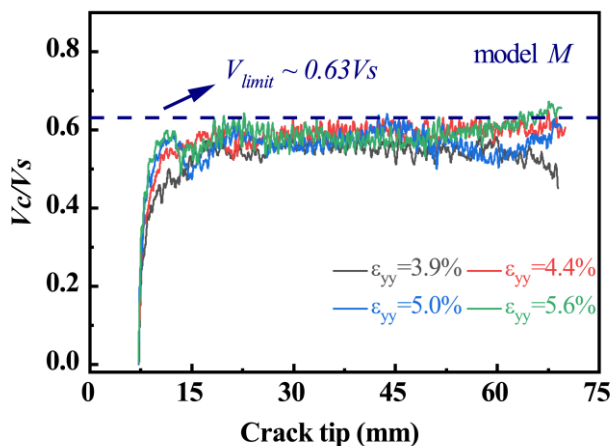


图 5.9 在四个不同应变状态的正则化的裂纹传播速度  $V_c / V_s$ 。

### 5.5.3 基于模型 P 的急速断裂预测

此处使用的新型动态相场模型 (Model P) 是为弥补经典 Model M 在非线性系统中的缺点而开发的。在采用与上一节相同的几何构型和材料参数的情况下，我们使用基于 Model P 的动态相场模型重新研究了预应变快速断裂。通过控制预拉伸强度，可以顺利地再现实验中观察到的一些有趣现象，例如裂纹振荡和尖端劈裂。

**(1) 直裂纹传播** 我们试探性的从预应变  $\varepsilon_{yy} = 5.6\%$  开始，一系列的裂纹演化图，如图 5.10(a) 的底部所示。与图 5.8(b) 中的 Model M 形成鲜明对比，新颖的 Model P 在相同的条件下却预测了一条简单的直裂纹。裂纹尖端的轮廓最初是抛物线状的，随着裂纹的扩展，逐渐转变为“蝌蚪状”的形状。有趣的是，这种独特

的断裂形态与 Bouchbinder 等人<sup>[9]</sup>的实验照片极其相似(见图 5.10 (a)顶部)。在现有研究中,这种现象可归因于动态裂纹传播与边界波反射的相互作用。为了与模型  $M$  进行定量比较,计算归一化的裂纹速度  $V_c/V_s$  并将其绘制在图 5.10 (b)。如图所示,存储的应变能驱动种子裂纹以极高的加速度开始。随着加速度的快速衰减,裂纹速度趋于稳定在  $0.88V_s$  左右。此稳定速度大大超过了模型  $M$  所给定的速度  $0.63V_s$ , 并且更接近无限大介质的速度<sup>[43]</sup>。

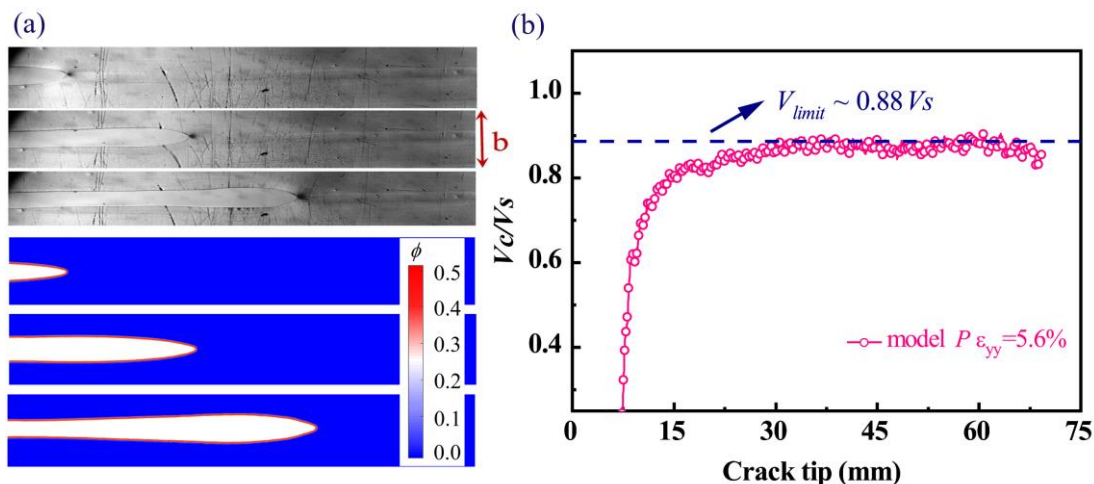


图 5.10 (a) 在预应变  $\varepsilon_{yy} = 5.6\%$  的相场和实验观察值的裂纹模式的比较; (b) 由相场所预测的正则化的裂纹速度。

**(2) 裂纹的振荡失稳** 以简单的直裂纹模拟为基础,我们在更高的预应变状态下  $\varepsilon_{yy} = 6.7\%$  重新执行相同的模拟。从而,捕获了期望中的裂纹振动不稳定性,并且其时间序列照片在图 5.11 (a) 给出。在动态断裂触发后,我们随即看到具有抛物线形裂纹尖端轮廓的简单直裂纹的扩展。与低应变的情况不同,单个直裂纹并不能长时间存在,很快正弦路径振荡开始出现,其振荡幅度随裂纹传播略有增加。考虑到基于能量最小化原理的纯粹自发路径选择,这种有限波长的振荡不稳定特别令人着迷。在初始构型下,其振荡特性甚至更加明显(参见图 5.11 (a) 的顶部)。为了进行比较分析,从文献中调用了一系列有关裂纹振荡不稳定性的实验照片,并将其放在图 5.11 (b) 中。很明显,基于模型  $P$  的相场模型描绘的裂纹轮廓与实际情况非常相似<sup>[10,30]</sup>,而这对于经典模型  $M$  来说是无法实现的。但是,请注意,仅凭这一证据还不足以得出模型  $P$  是完全可靠的结论。

如 Fineberg 等人<sup>[9]</sup>在实验中所发现的,当裂纹速度超过  $0.9V_s$ ,直裂纹开始失稳并以正弦路径振荡。有鉴于此,我们通过跟踪相场轮廓的发展来计算归一化的裂纹扩展速度,如图 5.12 所示。与应变状态  $\varepsilon_{yy} = 5.6\%$  相比,由于存储的能量更多,裂纹能够以更大的加速度启动,从而使裂纹速度最终达到更高的平台(超过  $0.9V_s$ )。通过精确地定位裂纹尖端的位置,我们可以确定裂纹振荡不稳定性对



应的裂纹速度为  $V_{onset} \approx 0.92 V_s$ ，非常接近于实验测量。一旦振荡不稳定激活后，裂纹速度立即开始波动，这也得到了实验的证实<sup>[9]</sup>。至此，我们有足够的证据可以证明，在非线性弹性断裂的背景下，新颖的模型  $P$  比经典的动态相场模型（模型  $M$ ）更真实。

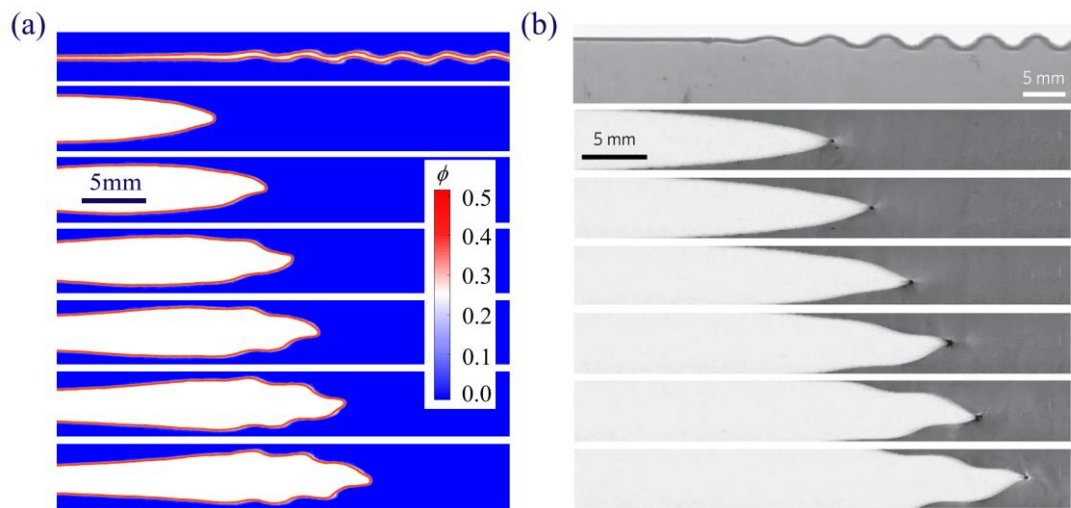


图 5.11 (a) 在预应变断裂下的相场 (a) 和实验观察 (b) 的裂纹模式的比较。

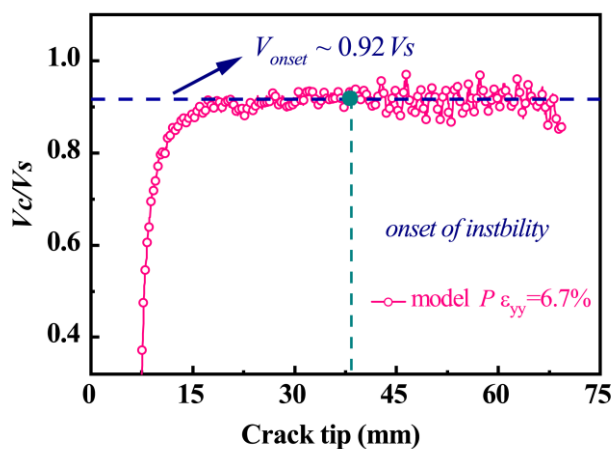


图 5.12 预应变为  $\epsilon_{yy} = 6.7\%$  的正则化的裂纹速度  $V_c / V_s$ 。

**(3) 高速裂纹分叉** 在前两小节中，裂纹扩展的驱动力，即裂纹前单位面积的储存应变能通过增加预应变而增强，导致裂纹的直-振荡过渡。因此，如果我们进一步提高驱动力，会不会出现裂纹分岔？为了找到答案，我们进行了一系列的模拟，前提是只有预应变是可改变的。稍微增加预应变到  $\epsilon_{yy} = 6.9\%$ ，一个期待中的尖端分裂失稳跟随裂纹振荡出现，如图 5.13(a) 所示。在裂纹分叉后，振荡失稳随之消失。进一步增加预应变，比如  $\epsilon_{yy} = 8.2\%$ ，直裂纹直接发生劈裂先于振荡失稳，如图 5.13(b) 所示。然而，尽管目前只观察到少量的痕迹，但随着分支裂纹的

生长，路径振荡显示出重新出现的迹象。令人欣慰的是，类似的现象不仅在实验中被观察到，Lubomirsky 等人<sup>[13]</sup>还使用基于物理的相场模型重现了这一现象。

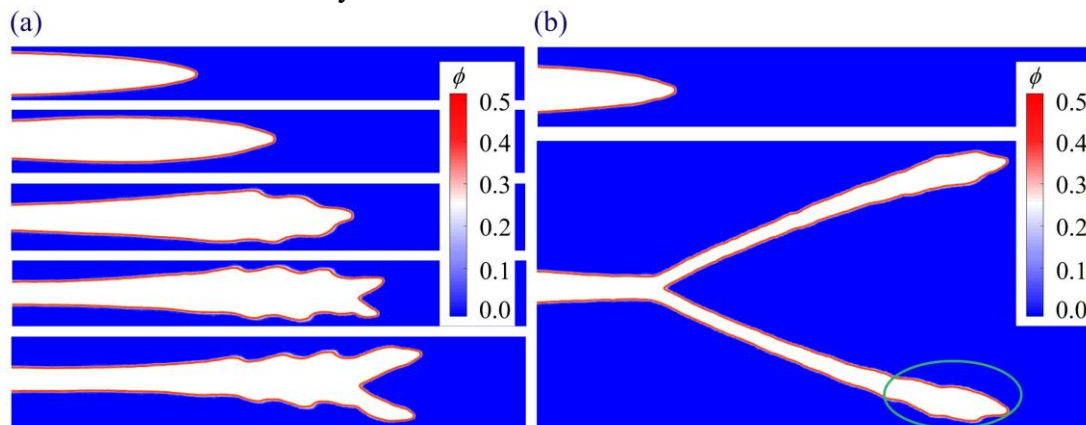


图 5.13 (a) 裂纹路径由振荡向分叉的转变在应变为  $\varepsilon_{yy} = 6.9\%$  时。(b) 裂纹分叉先于振荡在预应变为  $\varepsilon_{yy} = 8.2\%$ 。

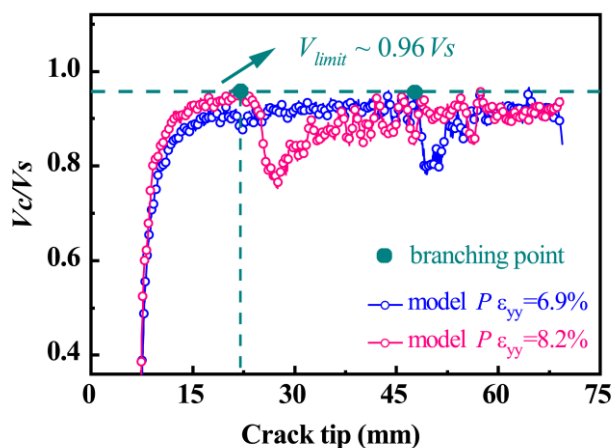


图 5.14 正则化的裂纹速度  $V_C / V_S$  在预应变分别为  $\varepsilon_{yy} = 6.9\%$  和  $\varepsilon_{yy} = 8.2\%$  时。

在图 5.14 中，对应图 5.13 裂纹模式的正则化的裂纹速度被给出。临界的裂纹尖端劈裂速度高达  $0.96 V_S$ ，轻微超过裂纹振荡速度  $\sim 0.92 V_S$ 。这种分岔失稳打破了原有的能量平衡，导致单个分枝的能量通量瞬间衰减，裂纹速度迅速下降。在此之后，随着裂纹速度的增加，会逐渐建立新的平衡，并可能再次触发振荡或尖裂失稳。表面上看，裂纹失稳与速度密切相关，但本质上取决于裂纹的驱动力。

#### 5.5.4 两种模型的差异

仿真结果表明，经典的  $M$  模型在非线性断裂系统中不再适用，而物理基模型  $P$  的预测结果与实验空前的符合。为了解释这个问题，我们回顾 Eq. 8，这是两个模型之间差异的来源。一般来说，波速取决于材料参数，比如剪切波速  $V_S = \sqrt{\mu / \rho}$ 。

由于相场损伤导致刚度退化，由模型  $M$  预测的剪切波速可以评估为  $V_s^M = \sqrt{f(\phi)\mu_0/\rho_0}$ ，这与真实的情况并不一致<sup>[30]</sup>。相反地，更加真实的模型  $P$  预测  $V_s^P = \sqrt{f(\phi)\mu_0/(f(\phi)\rho_0)} = \sqrt{\mu_0/\rho_0}$ ，独立于损伤变量。注意，裂纹的扩展需要远端介质的能量通过弹性波传输到尖端。因此，波速将不可避免地限制裂纹速度。对于模型  $M$ ，由于波速的损失，其极限裂纹速度远远低于理论极限。裂纹尖端的能量积累不能通过加速裂纹来释放，导致裂纹尖端的分裂。而对于模式  $P$ ，由于其恒定的波速特性，超高速裂纹振动和分岔可以顺利地再现。

## 5.6 小结

基于非保守的拉格朗日方程，我们在非线性变形的框架下推导了一种新型的动态相场模型，称为模型  $P$ 。模型  $P$  的独特波速不变性使其具有模拟超弹性材料快速断裂的卓越能力。然而，识别断裂路径所需的超细网格以及非线性弹性断裂中涉及的极端变形对于数值实现而言是艰巨的任务。因此，在保证足够好的网格需求的同时，调用已开发的 *ha*-PFM 来节省计算开销。此外，我们还发展了一种新的自适应变形网格移除算法，从根本上解决了变形网格对大变形断裂中数值稳定性的破坏。包含关键算法的详细数值程序在显式动力学的背景下进行了概述，其可靠性通过两个准静态断裂基准进行了验证。利用预应变断裂构型，实验中观察到的有趣的超高速裂纹振荡和裂纹尖端分裂不稳定性被新的  $P$  模型成功地再现。相反，经典的基于力学的动态相场模型  $M$  遇到故障，表明它不适用于非线性断裂系统。经过比较分析，我们得出的结论是，模型  $M$  的失败源于由于相场损伤而引起的波速的非物理衰减。最后，我们要强调的是，这项研究的重点是二维断裂，其中微分支的生长受到抑制。在随后的工作中，使用所提出的模型  $P$  研究具有固有 3D 性质的微分支不稳定性将是潜在的研究兴趣。

## 参考文献

- [1] Fineberg J, Marder M. Instability in dynamic fracture[J]. *Physics Reports*, 1999, 313: 1-108.
- [2] Bouchbinder E, Mathiesen J, Procaccia I. Branching instabilities in rapid fracture: Dynamics and geometry[J]. *Physical Review E*, 2005, 71: 056118.
- [3] Livne A, Cohen G, Fineberg J. Universality and hysteretic dynamics in rapid fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94: 224301.
- [4] Livne A, Bouchbinder E, Fineberg J. Breakdown of linear elastic fracture mechanics near the tip of a rapid crack[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 101: 264301.
- [5] Livne A, Bouchbinder E, Svetlizky I, Fineberg J. The near-tip fields of fast cracks[J]. *Science*, 2010, 327: 1359-1363.
- [6] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Local crack branching as a mechanism for instability in dynamic fracture[J]. *Physical Review Letters*, 1995, 74: 5096.
- [7] Fineberg J, Gross SP, Marder M, Swinney HL. Instability in dynamic fracture[J]. *Physical Review Letters*, 1991, 67: 457.
- [8] Ravi-Chandar K, Knauss W. An experimental investigation into dynamic fracture: IV. On the interaction of stress waves with propagating cracks[J]. *International Journal of Fracture*, 1984, 26: 189-200.
- [9] Bouchbinder E, Goldman T, Fineberg J. The dynamics of rapid fracture: instabilities, nonlinearities and length scales[J]. *Reports on Progress in Physics*, 2014, 77: 046501.
- [10] Livne A, Ben-David O, Fineberg J. Oscillations in rapid fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98: 124301.
- [11] Bouchbinder E. Dynamic crack tip equation of motion: high-speed oscillatory instability[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 103: 164301.
- [12] Goldman T, Harpaz R, Bouchbinder E, Fineberg J. Intrinsic nonlinear scale governs oscillations in rapid fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108: 104303.
- [13] Lubomirsky Y, Chen C-H, Karma A, Bouchbinder E. Universality and stability phase diagram of two-dimensional brittle fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2018, 121: 134301.
- [14] Freund LB. *Dynamic fracture mechanics*[M]. Cambridge University Press, 1998.
- [15] Broberg KB. *Cracks and fracture*[M]. Elsevier, 1999.
- [16] Ravi-Chandar K. *Dynamic fracture*[M]. Elsevier, 2004.
- [17] Bouchbinder E, Fineberg J, Marder M. Dynamics of simple cracks[J]. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2010, 1: 371-395.
- [18] Bouchbinder E, Livne A, Fineberg J. Weakly nonlinear theory of dynamic fracture[J]. *Physical Review Letters*, 2008, 101: 264302.
- [19] Bouchbinder E, Livne A, Fineberg J. Weakly nonlinear fracture mechanics: experiments and theory[J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 162: 3-20.
- [20] Francfort GA, Marigo JJ. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem[J]. *Journal*

- of the Mechanics and Physics of Solids, 1998, 46: 1319-1342.
- [21] Karma A, Kessler DA, Levine H. Phase-field model of mode III dynamic fracture[J]. Physical Review Letters, 2001, 87: 045501.
- [22] Henry H, Levine H. Dynamic instabilities of fracture under biaxial strain using a phase field model[J]. Physical Review Letters, 2004, 93: 105504.
- [23] Bourdin B, Francfort GA, Marigo JJ. The Variational Approach to Fracture[J]. Journal of Elasticity, 2008, 91: 5-148.
- [24] Karma A, Lobkovsky AE. Unsteady Crack Motion and Branching in a Phase-Field Model of Brittle Fracture[J]. Physical Review Letters, 2004, 92: 245510.
- [25] Bleyer J, Molinari J-F. Microbranching instability in phase-field modelling of dynamic brittle fracture[J]. Applied Physics Letters, 2017, 110: 151903.
- [26] Ambati M, Gerasimov T, De Lorenzis L. Phase-field modeling of ductile fracture[J]. Computational Mechanics, 2015, 55: 1017-1040.
- [27] Wu J, McAuliffe C, Waisman H, Deodatis G. Stochastic analysis of polymer composites rupture at large deformations modeled by a phase field method[J]. Computer Methods in Applied Mechanics Engineering 2016, 312: 596-634.
- [28] Shen R, Waisman H, Guo L. Fracture of viscoelastic solids modeled with a modified phase field method[J]. Computer Methods in Applied Mechanics Engineering Fracture Mechanics, 2019, 346: 862-890.
- [29] Zhang P, Hu X, Bui TQ, Yao W. Phase field modeling of fracture in fiber reinforced composite laminate[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2019, 161: 105008.
- [30] Chen C-H, Bouchbinder E, Karma A. Instability in dynamic fracture and the failure of the classical theory of cracks[J]. Nature Physics, 2017, 13: 1186-1190.
- [31] Tian F, Tang X, Xu T, Li L. An adaptive edge-based smoothed finite element method (ES-FEM) for phase-field modeling of fractures at large deformations[J]. arXiv preprint arXiv:10858, 2019.
- [32] Wu J-Y, Nguyen VP, Nguyen CT, Sutula D, Bordas S, Sinaie S. Phase field modeling of fracture[J]. Advances in Applied Mechancis: Multi-scale Theory and Computation, 2018, 52.
- [33] Tanné E, Li T, Bourdin B, Marigo J-J, Maurini C. Crack nucleation in variational phase-field models of brittle fracture[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2018, 110: 80-99.
- [34] Bourdin B, Marigo J-J, Maurini C, Sicsic P. Morphogenesis and propagation of complex cracks induced by thermal shocks[J]. Physical Review Letters, 2014, 112: 014301.
- [35] Swope WC, Andersen HC, Berens PH, Wilson KR. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters[J]. The Journal of Chemical Physics, 1982, 76: 637-649.
- [36] Li T, Marigo JJ, Guilbaud D, Potapov S. Gradient damage modeling of brittle fracture in an explicit dynamics context[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2016, 108: 1381-1405.
- [37] Sharon E, Gross SP, Fineberg J. Energy dissipation in dynamic fracture[J]. Physical Review Letters,

1996, 76: 2117.

- [38] Bleyer J, Roux-Langlois C, Molinari J-F. Dynamic crack propagation with a variational phase-field model: limiting speed, crack branching and velocity-toughening mechanisms[J]. *International Journal of Fracture*, 2017, 204: 79-100.
- [39] Mao Y, Anand L. A theory for fracture of polymeric gels[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2018, 115: 30-53.
- [40] Loew PJ, Peters B, Beex LA. Rate-dependent phase-field damage modeling of rubber and its experimental parameter identification[J]. *Journal of the Mechanics Physics of Solids*, 2019, 127: 266-294.
- [41] Bourdin B, Larsen CJ, Richardson CL. A time-discrete model for dynamic fracture based on crack regularization[J]. *International Journal of Fracture*, 2011, 168: 133-143.
- [42] Borden MJ, Verhoosel CV, Scott MA, Hughes TJR, Landis CM. A phase-field description of dynamic brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, 217-220: 77-95.
- [43] Goldman T, Livne A, Fineberg J. Acquisition of inertia by a moving crack[J]. *Physical Review Letters*, 2010, 104: 114301.

## 第 6 章 聚合物非牛顿流体的数值研究

### 6.1 引言

关于非牛顿流体力学的研究最早可以追溯到 1940 年代末到 1950 年代初,由流变学界的先驱 Rivlin<sup>[1]</sup>, Oldroyd<sup>[2]</sup>和 Lodge<sup>[3]</sup>等人所开创。早期的工作侧重于通过精确解析以及采用扰动方法来处理有序流体,这适用于较小 Deborah 数的流动。虽然这些方法在聚合物加工以及其他现实问题中很少使用,但是其为后来的数值技术提供了一片沃土<sup>[4-7]</sup>。在 1960 年代末和 1970 年代初,研究者们见证了非牛顿流数值模拟的工作如雨后春笋般冒出。最初,大量的工作集中在常微分方程的数值解,这是由用于低 Deborah 数流动的微扰方法所引起的。与此相关的是 Walters and Waters<sup>[8]</sup>, Griffiths<sup>[9, 10]</sup>以及 Davies<sup>[11]</sup>等人的工作。自 1970 年代初以来,关于非牛顿流问题数值解的文献呈爆炸性增长。大量的数值算法,复杂且精致的本构模型被提出以模拟非牛顿流体的奇异流变行为。在最近几十年,非牛顿流体的数值模拟方面的相关研究已经取得了相当大的进展,其已经发展为一个独立的学科-计算流变学<sup>[12]</sup>。然而,一些长期存在的挑战仍然有待解决,比如高 Weissenberg 数问题(HWNP)<sup>[13-16]</sup>,熔体破裂<sup>[17, 18]</sup>,动力学失稳<sup>[19, 20]</sup>等。

在塑料工业生产中,聚合物通常处于粘弹性的熔体状态。其作为广阔的非牛顿流体家族中的一个重要成员,相关的流变学研究是非常丰富的<sup>[7, 21-23]</sup>。然而,考虑到涉及复杂聚物流体的实验既昂贵又耗时,中断生产线操作以进行流变测量所涉及的成本可能高得令人望而却步。因此,近年来数值模拟已经成为研究聚合物熔体/流体加工的一个关键手段<sup>[12]</sup>。本章,我们将基于目前应用广泛的有限单元法建立聚合物非牛顿流体数值计算的基本框架。已经发展良好的不同类型的本构模型包括广义牛顿和粘弹性模型被简单概述。此外,对一些关键的数值策略,比如离散化与积分算法,稳定化算法,大变形网格重划分技术等基于具体的聚合物薄膜流延问题进行了一些推导。

### 6.2 基本平衡方程

在解决聚合物加工中的流动和传热问题时,我们必须满足质量、力或动量守恒和能量守恒<sup>[24, 25]</sup>。基于基本的守恒定律,我们将导出三个基本方程:连续性方程(质量守恒方程),运动方程(动力守恒方程),以及能量方程。

#### 6.2.1 连续性方程

质量守恒要求占据体积 $V(t)$ 的流体单元的质量变化率为零。这样我们可以写

出:

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = 0 \quad (6.1)$$

基于 Reynolds 输运定理, 方程 6.1 可以写为

$$\int_{V(t)} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right) dV = 0 \quad (6.2)$$

由于方程 6.2 对于任意封闭体积  $V$  都成立, 于是, 我们可以导出

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (6.3)$$

考虑体积不可压缩流体, 即,  $\frac{D\rho}{Dt} = 0$ , 从而方程 6.3 可以简化为:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (6.4)$$

### 6.2.2 运动方程

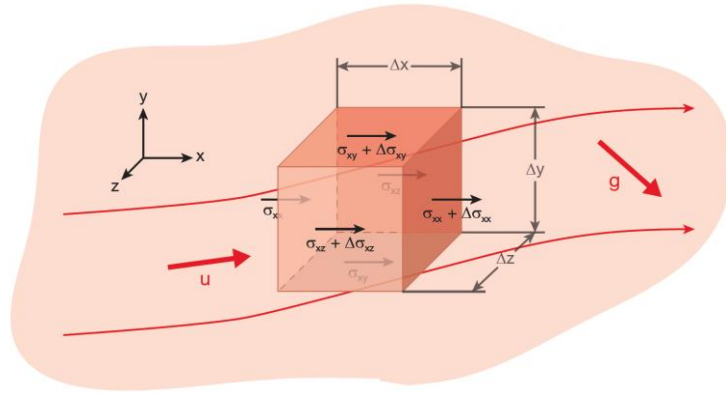


图 6.1 流体微元及其表面力分布。

考虑图 6.1 所示的体积微元  $V$  ( $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z$ ), 其力平衡方程 ( $V \rightarrow 0$ ) 在  $x$  坐标方向可以写为:

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} + \rho g_x \quad (6.5)$$

对于其三维情况, 我们可以直接给出:

$$\rho \frac{Dv_i}{Dt} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (6.6)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}$$

其中,  $\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}$  为速度矢量的物质导数。

此外, 在流体中, 我们通常将总应力  $\sigma_{ij}$  分解为偏应力  $\tau_{ij}$  以及流体静压力  $\sigma_H$ 。



其中  $\sigma_H = -p$ ，因此总应力可以写为：

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (6.7)$$

将方程 6.7 代入方程 6.6，可以导出动量平衡方程为

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (6.8)$$

### 6.2.3 能量守恒方程

对一个系统来说，我们以  $e$  和  $\mathbf{q}$  分别表示单位质量的内能和单位面积的热流矢量，基于能量守恒可以得到<sup>[24]</sup>

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \left( \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 + e \right) dV = \int_{V(t)} \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{v} dV + \int_{S(t)} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{v} dS - \int_{S(t)} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} dS \quad (6.9)$$

依照傅里叶热传导定律，我们可以用温度  $T$  的梯度来表示  $\mathbf{q}$

$$\mathbf{q} = -k\nabla T \quad (6.10)$$

其中， $k$  是流体的热导率。利用 Reynolds 输运定理可以导出

$$\rho \frac{De}{Dt} = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (k\nabla T) \quad (6.11)$$

同样，对于不可压缩流体，其能量方程可以表达为：

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} + \nabla \cdot (k\nabla T) \quad (6.12)$$

其中， $C_p$  表示比热容。

## 6.3 非牛顿流体的本构模型

在上一小节给出的基本方程的求解还需要补充一个本构方程。对于非牛顿流体来说，主要考虑两类本构模型：广义牛顿流体模型 (GNF) 以及粘弹性模型（积分粘弹性和微分粘弹性）。

### 6.3.1 广义牛顿模型

广义牛顿流体本质上是牛顿流体的非线性扩展<sup>[21]</sup>，即其表观粘度是剪切速率的函数。对于一个广义牛顿流体，其本构模型可以写为

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta \mathbf{D} \quad (6.13)$$

其中  $\eta$  是剪切粘度，其是局部剪切速率  $\dot{\gamma}$  和温度  $T$  的函数。局部剪切速率可以定义为

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2\text{tr}(\mathbf{D}^2)} \quad (6.14)$$

这里,  $\mathbf{D}$  为形变率张量 (见第一章), 定义为

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v}^T) \quad (6.15)$$

对于不同 GNF 模型, 其区别就在于  $\eta$  对应变速率以及温度的不同的依赖关系。我们首先考虑依赖剪切速率的粘度定律, 常用的模型有幂律模型 (Power Law)<sup>[26]</sup>, Bird-Carreau 模型<sup>[27]</sup>, Cross 模型<sup>[28]</sup>等。下面我们将给出这几个模型的具体表达式。

### (1) 幂律模型

幂律模型是由 Ostwald<sup>[26]</sup>和 de Wael<sup>[29]</sup>所提出的一个简单的模型, 其可以比较精确的描述剪切变稀行为, 但是无法描述低剪切速率行为。该模型可以写为:

$$\eta = K(\lambda\dot{\gamma})^{n-1} \quad (6.16)$$

其中,  $K$  为稠度指数,  $\lambda$  为松弛时间,  $n$  为流动特性指数, 其依赖于材料属性。一般来说,  $n < 1$  为剪切变稀流体,  $n = 1$  为牛顿流体,  $n > 1$  表示剪切增稠流体。

### (2) Bird-Carreau 模型

当需要描述流体在低剪切速率下的流动行为时, 通常使用 Bird-Carreau<sup>[27,30]</sup>以及后面会提到的 Cross 模型<sup>[28]</sup>。基于该模型的粘度依赖关系可以写为:

$$\eta = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left(1 + \lambda^2 \dot{\gamma}^2\right)^{\frac{n-1}{2}} \quad (6.17)$$

其中,  $\eta_{\infty}$  为极限剪切粘度,  $\eta_0$  表示在零剪切速率时的粘度。需要指出的是该模型通常用于食品, 饮料以及血液流动问题。

### (3) Cross 模型

由 Cross 等人<sup>[28]</sup>提出的一种非牛顿流体模型, 其粘度依赖可以表示为:

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + (\lambda\dot{\gamma})^m} \quad (6.18)$$

其中,  $\eta_0$  为零剪切粘度,  $m$  表示 Cross 模型指数。Cross 模型也通常用于描述非牛顿流体在低剪切速率的流动行为。

以上三种模型都是描述粘度的剪切速率依赖关系。如果考虑非等温的流动问题, 粘度的温度依赖性必须被考虑, 那么最终的粘度可以表示为

$$\eta = H(T)\eta_0(\dot{\gamma}) \quad (6.19)$$

其中,  $H(T)$  表示粘度的温度依赖方程,  $\eta_0(\dot{\gamma})$  表示在参考温度  $T_{\alpha}$  的粘度方程。根据关注的温度区间不同,  $H(T)$  的格式也有几种不同的选择。

在较高的温度区间, 如  $T > T_g + 100^{\circ}\text{C}$ , 一般选择 Arrhenius 方程<sup>[31]</sup>, 其表达式定义为:

$$H(T) = \exp\left[\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T - T_0} - \frac{1}{T_{\alpha} - T_0}\right)\right] \quad (6.20)$$

其中  $E_a$  表示活化能,  $R$  为气体常数,  $T_0$  为绝对零度,  $T_a$  为参考温度。

当所考虑的温度  $T_g < T < T_g + 100^\circ\text{C}$ , 粘度的 WLF 温度依赖定义为<sup>[32]</sup>:

$$\ln(H(T)) = \frac{c_1(T_r - T_a)}{c_2 + T_r - T_a} - \frac{c_1(T - T_a)}{c_2 + T - T_a} \quad (6.21)$$

其中,  $c_1$  和  $c_2$  均为 WLF 常数,  $T_r$  和  $T_a$  为参考温度。对于较大范围的温度描述,

尤其是在玻璃化转变温度附近, 通常可以选择 WLF 方程。

### 6.3.2 粘弹性模型

上一小节所展示的 GNF 模型无法描述与正应力和应力松弛有关的粘弹性现象, 比如典型的由法向应力差引起的聚合物的挤出胀大。因此, 要想更真实的模拟聚合物的流变性质, 粘弹性模型是一个更好的选择<sup>[12]</sup>。根据本构方程的形式, 粘弹性模型可以分为微分粘弹性模型以及积分粘弹性模型两大类。

#### (1) 微分粘弹性模型

常用的微分粘弹性模型有 Maxwell, Oldroyd-B<sup>[2]</sup>, PTT<sup>[33, 34]</sup>, Giesekus<sup>[35]</sup>, FENE-P<sup>[36]</sup>, POM-POM<sup>[37]</sup>等。在开始介绍这些模型之前, 我们先给出一些相关的理论基础。

对于粘弹性流动, 总的偏应力张量  $\boldsymbol{\tau}$  一般被分解为粘弹性组分  $\boldsymbol{\tau}_1$  和纯粘性组分  $\boldsymbol{\tau}_2$ , 即

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2 \quad (6.22)$$

其中,  $\boldsymbol{\tau}_1$  的计算基于所用的粘弹性本构模型,  $\boldsymbol{\tau}_2$  定义为

$$\boldsymbol{\tau}_2 = 2\eta_2 \mathbf{D} \quad (6.23)$$

这里,  $\eta_2$  是纯粘性系数。

此外, 我们直接给出在本构方程中常用的客观导数:

$$\frac{\delta \boldsymbol{\tau}}{\delta t} = \frac{\xi}{2} \overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}}_1 + \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 \quad (6.24)$$

在这里, 参数  $0 \leq \xi \leq 2$ ,  $\overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}}_1$  为粘弹性分量的下随体导数, 其定义为:

$$\overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}}_1 = \frac{D\boldsymbol{\tau}_1}{Dt} + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\tau}_1 \quad (6.25)$$

相应地, 上随体导数  $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1$  表示为:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 = \frac{D\boldsymbol{\tau}_1}{Dt} - \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \nabla \mathbf{v}^T - \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau}_1 \quad (6.26)$$

#### ① Upper-Convected Maxwell (UCM) 模型

UCM 是最简单的粘弹性本构模型，其特征为常粘度以及二次的第一法向应力差  $N_1$ ，鉴于其简单的流变特性，只有当有关流体的信息很少，或当定性预测是足够的情况下才被推荐使用。对于该模型，粘弹性应力分量  $\boldsymbol{\tau}_1$  的计算通过

$$\boldsymbol{\tau}_1 + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 = 2\eta_1 \mathbf{D} \quad (6.27)$$

需要注意的是，在 UCM 模型中，纯粘性组分为 0。

### ② Oldroyd-B 模型

Oldroyd-B 模型<sup>[2]</sup>的粘弹性组分同样通过式 6.26 计算。但是，与 UCM 模型不同的是，纯粘性组分  $\boldsymbol{\tau}_2$  被考虑，这使得 Oldroyd-B 模型相比 UCM 具有更好的数值稳定性。对于表现出较高的拉伸粘度的流动，Oldroyd-B 模型是一个不错的选择。

### ③ PTT 模型

PTT 模型<sup>[34]</sup>被认为是目前最真实的微分粘弹性本构模型之一，其高剪切速率下表现为剪切变稀属性以及非零的第一法向应力差。该模型定义为：

$$\exp\left[\frac{\alpha\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}_1)\right] \boldsymbol{\tau}_1 + \lambda \left[ \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 + \frac{\xi}{2} \overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}}_1 \right] = 2\eta_1 \mathbf{D} \quad (6.28)$$

其中，材料参数  $\alpha$  和  $\xi$  分别控制剪切粘度和拉伸属性。该模型也是我们数值模拟中主要采用的模型。

### ④ Giesekus 模型

同样地，Giesekus 模型<sup>[35]</sup>也被认为是最真实的微分粘弹性本构模型之一，其表达式为：

$$\left(1 + \frac{\alpha\lambda}{\eta_1} \boldsymbol{\tau}_1\right) \cdot \boldsymbol{\tau}_1 + \lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}_1 = 2\eta_1 \mathbf{D} \quad (6.29)$$

其中， $\alpha$  是材料参数。一个非零的  $\alpha$  将预测一个有界的稳态拉伸粘度和剪切粘度。

### ⑤ FENE-P 模型

上面所展示的四个模型本质上是 Oldroyd 族。而 FENE-P 模型是由分子理论所导出的<sup>[36]</sup>。在最简单的描述中，分子被描述成哑铃，由非线性的弹簧连接两个球。需要指出的是，这里的弹簧只允许有限伸长。该模型计算  $\boldsymbol{\tau}_1$  通过一个构象张量  $\mathbf{A}$ ，其格式如下：

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \frac{\eta_1}{\lambda} \left[ \frac{\mathbf{A}}{1 - \text{tr}(\mathbf{A})/3L^2} - \frac{\mathbf{I}}{1 - 1/L^2} \right] \quad (6.30)$$

其中，张量  $\mathbf{A}$  的计算通过：

$$\frac{\mathbf{A}}{1 - \text{tr}(\mathbf{A})/3L^2} + \lambda \overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{I}}{1 - 1/L^2} \quad (6.31)$$

其中  $L$  是弹簧的最大伸长量且满足  $L(\text{or } L^2) > 1$ 。

## ⑥ POM-POM 模型

POM-POM 模型是由 McLeish 和 Larson<sup>[38]</sup>在 1998 年基于 Doi-Edwards 管道理论所提出的一个粘弹性分子本构模型。该模型通过两个方程来描述拉伸和取向，其分子背景使得该模型适合于描述枝化聚合物。迄今，该模型已经经历了一系列的改进。Verbeeten 等人<sup>[39]</sup>在原始模型基础上开发了一个 eXtended POM-POM (XPP)模型并成功的模拟了枝化聚合物熔体的流变行为。然而，XPP 模型的存在着数值缺陷，为此，Clemeur 等人<sup>[40]</sup>又进一步开发一个 Double Convected POM-POM (DCPP)模型。该模型计算  $\boldsymbol{\tau}_1$  通过取向张量  $\mathbf{S}$  和拉伸标量  $\Lambda$ ，其表达式定义为：

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \frac{G}{1-\xi} (3\Lambda^2 \mathbf{S} - \mathbf{I}) \quad (6.32)$$

其中取向张量  $\mathbf{S}$  和拉伸标量  $\Lambda$  分别满足

$$\lambda \left[ \left( 1 - \frac{\xi}{2} \right) \nabla \cdot \mathbf{S} + \frac{\xi}{2} \dot{\Lambda} \right] + \lambda (1 - \xi) [2\mathbf{D} : \mathbf{S}] \mathbf{S} + \frac{1}{\Lambda^2} \left[ \mathbf{S} - \frac{\mathbf{I}}{3} \right] = 0 \quad (6.33)$$

以及

$$\lambda_s \frac{D\Lambda}{Dt} - \lambda_s (\nabla \mathbf{u} : \mathbf{S}) \Lambda + (\Lambda - 1) e^{-\frac{2(\Lambda-1)}{q}} = 0 \quad (6.34)$$

在以上方程中， $\lambda$  和  $\lambda_s$  分别对应取向和拉伸机制的松弛时间。不过，DCPP 模型仍然存在一些流变学的缺陷，Clemeur 和 Debbaut 等人<sup>[41]</sup>进一步对 DCPP 模型进行了修正，称之为 MDCPP 模型，具体表达式可参考相关的文献。

## (2) 积分粘弹性本构模型

前面提到的微分型本构模型通常采用多模态松弛时间来模拟聚合物熔体的连续松弛时间谱。然而，在所有的唯象模型中，描述聚合物粘弹性流体最成功的确是积分模型。实际上，由于聚合物熔体的记忆效应，基于分子理论导出的模型通常都是积分型。目前应用比较多的是 KBKZ 模型<sup>[42]</sup>，Doi-Edwards 模型<sup>[43, 44]</sup>等。

## ① KBKZ 模型

通过引入一个阻尼函数，KBKZ 模型相比其他积分本构模型可以提供额外的准确性<sup>[42]</sup>。该模型通过如下显式格式来计算粘弹性应力  $\boldsymbol{\tau}_1$

$$\boldsymbol{\tau}_1 = \frac{1}{1-\theta} \int_0^\infty \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{\lambda_i^2} \exp\left(-\frac{s}{\lambda_i}\right) H(I_1, I_2) \left[ C_i^{-1}(t-s) + \theta C_i(t-s) \right] ds \quad (6.35)$$

其中， $C_i$  为柯西-格林应变张量。 $I_1, I_2$  定义为

$$I_1 = \text{tr}(C_i^{-1}), I_2 = \text{tr}(C_i) \quad (6.36)$$

式 6.34 中  $i$  代表松弛模式， $\theta$  控制法向应力差的比值，定义为：

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{\theta}{1-\theta} \quad (6.37)$$

$H$  是阻尼函数。其具有几种不同的格式。比如，一个 PSM 模型定义  $H$  为

$$H = \frac{\alpha}{\alpha + I - 3} \quad (6.38)$$

### ② Doi-Edwards 模型

Doi-Edwards 模型<sup>[44]</sup>预测了一个非零的第二法向应力差以及有限的稳定拉伸粘度，在该模型框架下， $\tau_1$  的计算通过：

$$\tau_1 = \int_0^\infty \frac{96\eta}{\pi^4 \lambda^2} \sum_{k=1}^\infty \exp\left(\frac{-(2k+1)^2 s}{\lambda}\right) [\Phi_1 C_i^{-1}(t-s) + \Phi_2 C_i(t-s)] ds \quad (6.39)$$

其中

$$\Phi_1 = 5 [I_1 + 2(I_2 + 3.25)^{0.5} - 1]^{-1} \quad (6.40)$$

$$\Phi_2 = -\Phi_1 (I_2 + 3.25)^{-0.5} \quad (6.41)$$

在方程 6.38 中， $k$  代表松弛模式， $s$  是时间积分度量， $\Phi_1$  和  $\Phi_2$  是 Doi-Edwards 模型的标量不变量。

需要指出的是，尽管积分型本构模型具有流变描述的优势，但是其数值实施是一个极大的挑战，因此，目前来说，微分型本构模型的应用更为广泛。

## 6.4 数值实施案例

目前，非牛顿流体的数值计算已经取得了相当大的进展。为清晰起见，我们将以聚合物加工中重要的粘弹性薄膜流延为实例介绍非牛顿流体的数值计算的一系列关键技术。该案例涉及复杂的多物理场耦合求解，且相关的推导也是下一章节的非等温流延稳定性分析的基础。

### 6.4.1 控制方程-膜模型

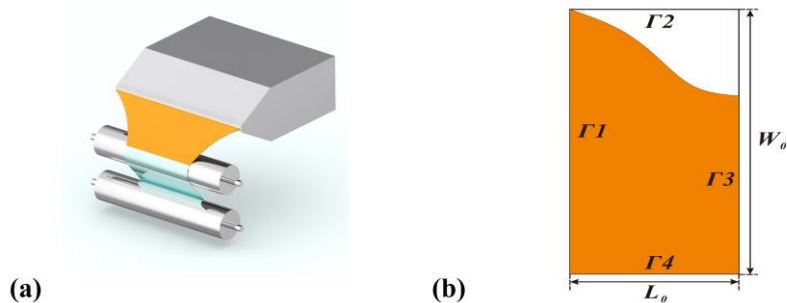


图 6.2 (a) 薄膜流延的三维示意图。(b) 对应的二维几何模型 (考虑对称性)。

如图 6.2 (a) 所示，实际的薄膜流延是一个三维 (3D) 问题。但是，考虑到厚

度尺度相比薄膜宽度和口模间距非常小，因此，一个二维的简化模型是可行的。由于对称性，我们只需考虑一半的几何模型，如图 6.2 (b)。基于 Agassant 等人<sup>[45, 46]</sup>提出的膜模型，在 6.2 节给出的流体的基本方程（质量，动量以及能量守恒）可以在厚度平均的操作下导出如下的一系列二维的膜模型的控制方程[32, 40]：

$$\begin{cases} \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot e\mathbf{v} = 0 \\ \nabla \cdot e(\boldsymbol{\tau} + 2\eta_s \mathbf{D}) = 0 \\ \rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\frac{2h}{e} (T - T_e) \end{cases} \quad (6.42)$$

这里  $e$  为薄膜的厚度， $\mathbf{v} = (u(x, y), v(x, y))$  是厚度平均的速度场， $\boldsymbol{\tau}$  是总的额外应力的粘弹性分量（即上一节中  $\boldsymbol{\tau}_1$ ），相应地， $\boldsymbol{\tau}_2 = 2\eta_s \mathbf{D}$ 。此外， $\rho$  表示密度， $C_p$  为比热容， $T$  为厚度平均地温度场， $T_e$  为环境温度， $h$  为自然以及强制对流的传热系数。

由于涉及自由表面，因此需要定义自由表面的运动方程：

$$\frac{\partial w}{\partial t} + v_x \frac{\partial w}{\partial x} = v_y \quad (6.43)$$

其中， $w$  表示薄膜的半宽度（见图 6.2(b)）。而  $v_x$  和  $v_y$  分别表示  $x, y$  轴方向的速度分量。

为了求解上述方程，我们还需要添加一个本构方程，著名的 PTT 本构模型被采用，其方程给出如下<sup>[33, 34]</sup>：

$$\exp\left[\frac{\alpha\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})\right] \boldsymbol{\tau} + \lambda \left[ \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \frac{\xi}{2} \overset{\Delta}{\boldsymbol{\tau}} \right] = 2\eta_p \mathbf{D} \quad (6.44)$$

其中随体导数的表达式参考公式 6.24 和 6.25。

在非等温条件下，还需要考虑温度对流变性质的影响，粘度和松弛时间的温度依赖由 Arrhenius 方程来描述<sup>[31]</sup>，其定义为：

$$\lambda = \lambda_0(T_\alpha) \cdot H(T), \quad \eta = \eta_p(T_\alpha) \cdot H(T) \quad (6.45)$$

$$H(T) = \exp\left[\frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T - T_0} - \frac{1}{T_\alpha - T_0} \right)\right] \quad (6.46)$$

在给出本构方程之后，我们指定该物理模型的具体的边界和初始条件（对称性被考虑）：

(a) 入口边界：

$v_x = v_{in}, v_y = 0, e = e_0, w = W_0, T = T_\alpha, \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_0$  在边界  $\Gamma_1$ ，在时刻  $t \geq 0$ 。

(b) 自由表面边界：

$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ ,  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ ,  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$  在边界  $\Gamma_2$ ,  $t \geq 0$ .

(c) 出口边界

$v_x = v_{in} \cdot Dr$ ,  $v_y = 0$ ,  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$  在边界  $\Gamma_3$ ,  $t = 0$ .

$v_x = v_{in} \cdot Dr \cdot (1 + \delta)$ ,  $v_y = 0$ ,  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$  在边界  $\Gamma_3$ ,  $t > 0$ .

(d) 对称边界:

$\sigma_{xy} = 0$ ,  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$  在边界  $\Gamma_4$ ,  $t \geq 0$ .

其中,  $\mathbf{n}$  边界法向量,  $\mathbf{q}$  为热流密度,  $Dr$  为薄膜拉伸比.

## 6.4.2 稳定化算法

(1) DEVSS 方法

当采用一般格式的 Galerkin 离散的有限元进行数值计算时, 上述控制方程存在数值不稳定的问题。这种不稳定一般有两个来源: (1) 动量方程缺少足够的椭圆性; (2) 本构方程的对流占优。为了解决第一个问题, Rajagopalan 等人<sup>[47]</sup>提出了一个 elastic-viscous split-stress (EVSS) 方法。该方法在动量方程中引入了一个椭圆算子从而提高了数值稳定性。但是, EVSS 方法需要修改控制方程涉及速度的二阶导, 这对于复杂的本构模型如 POM-POM 等是一个相当棘手的问题。为此, Guenette 和 Fortin<sup>[48]</sup>介绍了一个离散 EVSS 方法 (DEVSS), 该方法在动量方程中引入的椭圆项  $2\eta_0 \mathbf{D} - 2\eta_p \mathbf{d}$ , 但是避免了 EVSS 方法中所需的应变率张量的客观导数。凭借这一优势, 该方法不再局限于简单的本构模型。

在 DEVSS 方法的框架下, 式 6.41 中的动量方程被改写为:

$$\nabla \cdot \mathbf{e}(\boldsymbol{\tau} + 2\eta_0 \mathbf{D} - 2\eta_p \mathbf{d}) = 0 \quad (6.47)$$

其中,  $\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$  为形变率张量,  $\eta_0 = \eta_s + \eta_p$ ,  $\eta_p$  为聚合物的粘度, 其遵循公式 6.44 的温度依赖性。此外,  $\mathbf{d}$  被当作一个额外变量, 且满足:

$$(\mathbf{E}, \mathbf{d} - \mathbf{D}) = 0 \quad (6.48)$$

其中, 符号  $(\cdot, \cdot)$  表示内积,  $\mathbf{E}$  为权函数,  $\mathbf{d}$  是形变率张量的离散近似。

(2) SUPG/SU 算法

为了处理本构方程中的对流项, Brooks 和 Hughes<sup>[49]</sup>开发一种 streamline-upwind/Petrov-Galerkin (SUPG) 算法。该方法将标准的 Galerkin 插值形函数  $N_q$  修改为:

$$W = N_q + \frac{\bar{k} \mathbf{v}}{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}} \cdot \nabla N_q \quad (6.49)$$

其中,  $\bar{k}$  依赖于单元尺寸。W 将作用于整个本构方程。此外, 对于涉及自由表面



的计算, 应用 SUPG 算法也会改善数值计算的稳定性。

然而, 在陡峭的应力边界层或接近奇异点时, SUPG 算法会产生振荡的应力场。为了解决这个问题, Marchal 和 Crochet<sup>[50]</sup>提出了一个 SU 方法, 在该方法中, 迎风项  $\frac{\bar{k}\mathbf{v}}{\mathbf{v}\cdot\mathbf{v}}\cdot\nabla N_q$  只施加在本构方程的对流项上。

### (3) DG 法

可以替代 SUPG 或 SU 方法的是不连续的 Galerkin (DG) 或 Lesaint-Raviart 方法<sup>[51]</sup>。该方法中, 附加应力张量从一个单元间断地近似到下一个单元, 其迎风稳定给出如下:

$$\left( N_q, \exp\left[\frac{\alpha\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau})\right] \boldsymbol{\tau} + \lambda\left[\left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \boldsymbol{\tau} + \frac{\xi}{2} \boldsymbol{\tau}^\Delta\right] - 2\eta_p \mathbf{D} \right) - \sum_{e=1}^N \int_{\Gamma_e^{\text{in}}} N_q : \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} (\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}^{\text{ext}}) d\Gamma = 0 \quad (6.50)$$

其中  $\mathbf{n}$  是边界单元  $e$  的外法向矢量,  $\Gamma_e^{\text{in}}$  为单元  $e$  的边界部分,  $\boldsymbol{\tau}^{\text{ext}}$  为相邻迎风单元的附加应力张量。在粘弹性背景下, 该方法由 Fortin 等人<sup>[51]</sup>首次介绍。由于每个单元在流入边界上的积分需要邻近迎风单元的应力信息, 因此, DG 方法在标准有限元代码中的实现相比 SUPG 格式要复杂得多。

## 6.4.3 空间-时间离散化

在流延过程中, 跟踪非线性动力学响应需要求解一个与时间依赖的流动。为了从数值上解决这一问题, 物理模型的空间-时间离散化是必要的。我们采用四边形单元对计算域进行离散化。未知量  $e$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$ ,  $\mathbf{d}$ ,  $T$  以及  $H$  (Arrhenius 因子) 依照拉格朗日基函数被离散

$$e = \sum_{i=1}^n N_q^i e_i, \quad \mathbf{v} = \sum_{i=1}^n N_q^i \mathbf{v}_i, \quad \boldsymbol{\tau} = \sum_{i=1}^m N_b^i \boldsymbol{\tau}_i, \quad \mathbf{d} = \sum_{i=1}^m N_b^i \mathbf{d}_i, \quad (6.51)$$

$$T = \sum_{i=1}^n N_q^i T_i, \quad H = \sum_{i=1}^m N_b^i H_i$$

其中,

$$N_q = (N_q^1, N_q^2, \dots, N_q^n)^T, \quad (n=1, 2, 3, \dots, 9) \quad (6.52)$$

和

$$N_b = (N_b^1, N_b^2, \dots, N_b^m)^T, \quad (m=1, 2, 3, 4) \quad (6.53)$$

分别是二次和双线性形函数。指标  $n$  和  $m$  是单元节点总数, 上标  $T$  表示转置。引入 DEVSS/SUPG/SU 方法对控制方程进行离散化。通过分部积分, 我们可以得

到如下控制方程的弱形式:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{DEVSS \& SUPG \& SU :} \\
 \int_{\Omega} W \left( \frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla e + e \nabla \cdot \mathbf{v} \right) d\Omega = 0 \\
 \int_{\Omega} \nabla N_q e (\boldsymbol{\tau} + 2\eta_0 \mathbf{D} - 2\eta_p \mathbf{d}) d\Omega - \int_{\partial\Omega} N_q e (\boldsymbol{\tau} + 2\eta_0 \mathbf{D} - 2\eta_p \mathbf{d}) \cdot \mathbf{n} d\Omega = 0 \\
 \int_{\Omega} \left( N_b \left[ \exp \left[ \frac{\alpha \lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}) \right] \boldsymbol{\tau} + \lambda \left[ \left( 1 - \frac{\xi}{2} \right) \boldsymbol{\tau} + \frac{\xi}{2} \boldsymbol{\tau} \right] - 2\eta_p \mathbf{D} \right] + \frac{\bar{k} \mathbf{v} \cdot \nabla N_b}{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}} \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} \right) d\Omega = 0 \quad (6.54) \\
 \int_{\Omega} N_b (\mathbf{D} - \mathbf{d}) d\Omega = 0 \\
 \int_{\Omega} N_q \left[ \rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) - \frac{2h}{e} (T - T_e) \right] d\Omega = 0 \\
 \int_{\Omega} N_b [(T - T_0)(T_a - T_0) \ln(H) + E_a (T - T_a)] d\Omega = 0
 \end{array} \right.$$

其中,  $W$  为 SUPG 形函数(公式 6.48)。

考虑到时间离散, 目前已经发展起来的时间步进算法有显式欧拉法、隐式欧拉法、Galerkin 法和 Crank-Nicolson 法等。在这里, 我们讨论的控制方程格式如下:

$$\mathbf{M}(\mathbf{X})\dot{\mathbf{X}} + \mathbf{K}(\mathbf{X})\mathbf{X} + \mathbf{F}(\mathbf{X}) = \mathbf{0} \quad (6.55)$$

其中,  $\mathbf{M}$  是质量矩阵,  $\mathbf{K}$  表示刚度矩阵,  $\mathbf{F}$  为等效的节点力矢量。  $\mathbf{X}$  表示未知节点矢量, 如  $e$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\boldsymbol{\tau}$ ,  $\mathbf{d}$ ,  $T$  以及  $H$ 。

一阶导  $\dot{\mathbf{X}}$  通过一阶离散近似为:

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{\mathbf{X}_{n+1} - \mathbf{X}_n}{\Delta t_n} \quad (6.56)$$

其中, 上标  $n$  和  $n+1$  表示两个相邻的时间步。为了加速迭代, 一个因子  $\theta$  被引入, 于是我们得到下面的格式:

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t (\theta \mathbf{X}_{n+1} + (1-\theta) \mathbf{X}_n) \quad (6.57)$$

其中,  $0 \leq \theta \leq 1$ 。  $\theta$  的不同取值对应不同的方法。在我们的计算中,  $\theta = 1$  对应隐式欧拉法, 其是无条件稳定的。在此背景下, 方程 6.54 可以改写为:

$$\left( \frac{\mathbf{M}(\mathbf{X})}{\Delta t} + \mathbf{K}(\mathbf{X}) \right) \mathbf{X}_{n+1} = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{X})}{\Delta t} \mathbf{X}_n - \mathbf{F}_{n+1} \quad (6.58)$$

#### 6.4.4 线性化

方程组 6.53 中的弱形式是高度非线性的。要求解该方程组, 我们需要对其进行线性化。我们采用具备二次收敛的 Newton-Raphson 法:

$$\frac{\partial \mathbf{R}^i}{\partial \mathbf{X}_{n+1}^i} \Delta \mathbf{X} = -\mathbf{R}^i \quad (6.59)$$

其中  $\mathbf{R}$  为残差矢量，上标  $i$  表示迭代次数。于是方程 6.57 可以重写为：

$$\left( \frac{\tilde{\mathbf{M}}^{i+1}}{\Delta t} + \tilde{\mathbf{K}}^{i+1} \right) (\mathbf{X}_{n+1}^{i+1} - \mathbf{X}_{n+1}^i) = -\mathbf{R}_{n+1}^{i+1}, \quad (6.60)$$

其中，

$$\mathbf{X} = [\mathbf{e}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{d}, \mathbf{T}, \mathbf{H}]^T \quad (6.61)$$

以及

$$\begin{cases} \mathbf{v} = [u, v] \\ \boldsymbol{\tau} = [\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yy}, \tau_{zz}] \\ \mathbf{d} = [d_{xx}, d_{xy}, d_{yy}, d_{zz}] \end{cases} \quad (6.62)$$

是当前问题的未知矢量以及残差矢量为：

$$\mathbf{R} = [\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_v, \mathbf{R}_\tau, \mathbf{R}_d, \mathbf{R}_T, \mathbf{R}_H]^T \quad (6.63)$$

此外，按照标准的 FEM 方法，每个单元的质量矩阵可以表示为：

$$\tilde{\mathbf{M}}^E = \text{diag}(\mathbf{M}_e^E, \mathbf{M}_v^E, \mathbf{M}_\tau^E, \mathbf{M}_d^E, \mathbf{M}_T^E, \mathbf{M}_H^E) \quad (6.64)$$

式中：

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e^E &= \int_{\Omega_E} \mathbf{W} \mathbf{N}_q^T d\Omega_E, \quad \mathbf{M}_v^E = \mathbf{M}_d^E = \mathbf{M}_H^E = \mathbf{0} \\ \mathbf{M}_\tau^E &= \int_{\Omega_E} \lambda \mathbf{N}_b \mathbf{N}_b^T d\Omega_E, \quad \mathbf{M}_T^E = \int_{\Omega_E} \rho C_p \mathbf{N}_q \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.65)$$

显然， $\mathbf{M}^E$  是一个对角方阵，其将在每一次迭代过程中更新。同样的，单元的刚度矩阵可以表示为：

$$\tilde{\mathbf{K}}^E = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{K}}_{ee}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{ev}^E & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{ve}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{vv}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{v\tau}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{vd}^E & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{K}}_{\tau v}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{\tau\tau}^E & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{K}}_{\tau H}^E \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{K}}_{dv}^E & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{K}}_{dd}^E & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \tilde{\mathbf{K}}_{Te}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{Tv}^E & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{K}}_{TT}^E & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{K}}_{HT}^E & \tilde{\mathbf{K}}_{HH}^E \end{bmatrix} \quad (6.66)$$

其中的子矩阵具体表达式为：

$$\tilde{\mathbf{K}}_{ee}^E = \mathbf{K}_{ee}^E = \int_{\Omega_E} \mathbf{W} \left( (u^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} + v^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y}) + \left( \frac{\partial u^E}{\partial x} + \frac{\partial v^E}{\partial y} \right) \mathbf{N}_q^T \right) d\Omega_E \quad (6.67)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{ev}^E = [\mathbf{K}_{eu}^E, \mathbf{K}_{ev}^E] \quad (6.68)$$

$$\mathbf{K}_{eu}^E = \int_{\Omega_E} \mathbf{W} \left( \frac{\partial e^E}{\partial x} \mathbf{N}_q^T + \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} e^E \right) d\Omega_E, \quad \mathbf{K}_{ev}^E = \int_{\Omega_E} \mathbf{W} \left( \frac{\partial e^E}{\partial y} \mathbf{N}_q^T + \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} e^E \right) d\Omega_E \quad (6.69)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{ve}^E = [\mathbf{K}_{ue}^E, \mathbf{K}_{ve}^E]^T \quad (6.70)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{ue}^E = & \int_{\Omega_E} \eta_0 \left( 4 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial u^E}{\partial x} + 2 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial u^E}{\partial y} + 2 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial v^E}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial v^E}{\partial x} \right) \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \\ & + \int_{\Omega_E} \left( \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} (\tau_{11}^E - \tau_{33}^E) + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \tau_{12}^E \right) \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \\ & - \int_{\Omega_E} \eta_p \left( \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} (d_{xx} - d_{zz}) + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} d_{xy} \right) \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.71)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{ve}^E = & \int_{\Omega_E} \eta_0 \left( \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial u^E}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} \frac{\partial u^E}{\partial x} + 4 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial v^E}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial v^E}{\partial x} \right) \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \\ & + \int_{\Omega_E} \left( \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} (\tau_{22}^E - \tau_{33}^E) + \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} \tau_{12}^E \right) \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \\ & - \int_{\Omega_E} \eta_p \left( \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} (d_{22} - d_{33}) + \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} d_{12} \right) \mathbf{N}_q^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.72)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{vv}^E = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu}^E & \mathbf{K}_{uv}^E \\ \mathbf{K}_{vu}^E & \mathbf{K}_{vv}^E \end{bmatrix}, \quad (6.73)$$

$$\mathbf{K}_{uu}^E = \int_{\Omega_E} \eta_0 \left( 4 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} \right) d\Omega_E \quad (6.74)$$

$$\mathbf{K}_{uv}^E = \int_{\Omega_E} \eta_0 \left( 2 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} \right) d\Omega_E \quad (6.75)$$

$$\mathbf{K}_{vu}^E = \int_{\Omega_E} \eta_0 \left( \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} + 2 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} \right) d\Omega_E \quad (6.76)$$

$$\mathbf{K}_{vv}^E = \int_{\Omega_E} \eta_0 \left( 4 \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} \right) d\Omega_E \quad (6.77)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{v\tau}^E = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{u\tau_{11}}^E & \mathbf{K}_{u\tau_{12}}^E & \mathbf{0} & \mathbf{K}_{u\tau_{33}}^E \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{v\tau_{12}}^E & \mathbf{K}_{v\tau_{22}}^E & \mathbf{K}_{v\tau_{33}}^E \end{bmatrix} \quad (6.78)$$

$$\mathbf{K}_{u\tau_{11}}^E = -\mathbf{K}_{u\tau_{33}}^E = \mathbf{K}_{v\tau_{12}}^E = \int_{\Omega_E} e^E \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial x} \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \quad (6.79)$$

$$\mathbf{K}_{u\tau_{12}}^E = \mathbf{K}_{v\tau_{22}}^E = -\mathbf{K}_{v\tau_{33}}^E = \int_{\Omega_E} e^E \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \quad (6.80)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\text{vd}}^E = -2\eta_0 \tilde{\mathbf{K}}_{\text{vt}}^E \quad (6.81)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\text{tv}}^E = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\tau_{11}^E}^E & \mathbf{K}_{\tau_{11}^E}^E \\ \mathbf{K}_{\tau_{12}^E}^E & \mathbf{K}_{\tau_{12}^E}^E \\ \mathbf{K}_{\tau_{22}^E}^E & \mathbf{K}_{\tau_{22}^E}^E \\ \mathbf{K}_{\tau_{33}^E}^E & \mathbf{K}_{\tau_{33}^E}^E \end{bmatrix} \quad (6.82)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{11}^E}^E &= \int_{\Omega_E} (2\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b \tau_{33}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} + \mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{11}}{\partial x} \mathbf{N}_q^T) H d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b (\lambda_0(\xi-2)\tau_{12}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q}{\partial y} - 2\eta_p \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x}) H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.83)$$

$$\mathbf{K}_{\tau_{11}^E}^E = \int_{\Omega_E} (\lambda_0 \xi \mathbf{N}_b \tau_{12}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} + \mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{11}}{\partial y} \mathbf{N}_q^T) H d\Omega_E \quad (6.84)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{12}^E}^E &= \int_{\Omega_E} (\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b \tau_{11}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} + \mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{12}}{\partial x} \mathbf{N}_q^T) H d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b (\frac{1}{2} \lambda_0 (\xi \tau_{12}^E + (\xi-2)\tau_{22}^E) \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} - \eta_p \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y}) H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.85)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{12}^E}^E &= \int_{\Omega_E} (\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b \tau_{12}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} + \mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{12}}{\partial y} \mathbf{N}_q^T) H d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b (\frac{1}{2} \lambda_0 ((\xi-2)\tau_{11}^E + \xi \tau_{22}^E) \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} - \eta_p \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x}) H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.86)$$

$$\mathbf{K}_{\tau_{22}^E}^E = \int_{\Omega_E} (\lambda_0 \xi \mathbf{N}_b \tau_{12}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} + \mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{22}}{\partial x} \mathbf{N}_q^T) H d\Omega_E \quad (6.87)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{22}^E}^E &= \int_{\Omega_E} (\lambda_0(\xi-2)\mathbf{N}_b \tau_{12}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} + \mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{22}}{\partial y} \mathbf{N}_q^T) H d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b (2\lambda_0(\xi-1)\tau_{22}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} - 2\eta_p \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x}) H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.88)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{33}^E}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W} \lambda_0 \frac{\partial \tau_{33}^E}{\partial x} \mathbf{N}_q^T - 2\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b \tau_{33}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x}) H d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} 2\mathbf{N}_b \eta_p \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.89)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{33}^E}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{33}^E}{\partial y} \mathbf{N}_q^T - 2\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b \tau_{33}^E \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y}) H d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} 2\mathbf{N}_b \eta_p \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.90)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\tau\tau}^E = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{\tau_{11}\tau_{11}}^E & \mathbf{K}_{\tau_{11}\tau_{12}}^E & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{K}_{\tau_{12}\tau_{11}}^E & \mathbf{K}_{\tau_{12}\tau_{12}}^E & \mathbf{K}_{\tau_{12}\tau_{22}}^E & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\tau_{22}\tau_{12}}^E & \mathbf{K}_{\tau_{22}\tau_{22}}^E & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{K}_{\tau_{33}\tau_{33}}^E \end{bmatrix}, \quad (6.91)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{11}\tau_{11}}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 (\frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial x} u^E + \frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial y} v^E) H + \mathbf{N}_b \exp(\alpha \frac{\lambda \text{trace}(\boldsymbol{\tau})}{\eta_p}) \mathbf{N}_b^T) d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} 2(\xi-1)\mathbf{N}_b \lambda_0 \frac{\partial u^E}{\partial x} \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.92)$$

$$\mathbf{K}_{\tau_{11}\tau_{12}}^E = \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b \lambda_0 ((\xi-2) \frac{\partial u^E}{\partial y} + \xi \frac{\partial v^E}{\partial x}) \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \quad (6.93)$$

$$\mathbf{K}_{\tau_{12}\tau_{11}}^E = \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b \lambda_0 ((\xi-2) \frac{\partial v^E}{\partial x} + \xi \frac{\partial u^E}{\partial y}) \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \quad (6.94)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{12}\tau_{12}}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 (\frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial x} u^E + \frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial y} v^E) H + \mathbf{N}_b \exp(\alpha \frac{\lambda \text{trace}(\boldsymbol{\tau})}{\eta_p}) \mathbf{N}_b^T) d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} 2(\xi-1)\mathbf{N}_b \lambda_0 \frac{\partial u^E}{\partial x} \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.95)$$

$$\mathbf{K}_{\tau_{12}\tau_{22}}^E = \int_{\Omega_E} \frac{1}{2} \mathbf{N}_b \lambda_0 ((\xi-2) \frac{\partial u^E}{\partial y} + \xi \frac{\partial v^E}{\partial x}) \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \quad (6.96)$$

$$\mathbf{K}_{\tau_{22}\tau_{12}}^E = \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b \lambda_0 ((\xi-2) \frac{\partial v^E}{\partial x} + \xi \frac{\partial u^E}{\partial y}) \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \quad (6.97)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{22}\tau_{22}}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 (\frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial x} u^E + \frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial y} v^E) H + \mathbf{N}_b \exp(\alpha \frac{\lambda \text{trace}(\boldsymbol{\tau})}{\eta_p}) \mathbf{N}_b^T) d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} 2(\xi-1)\mathbf{N}_b \lambda_0 \frac{\partial v^E}{\partial y} \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.98)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{33}\tau_{33}}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 (\frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial x} u^E + \frac{\partial \mathbf{N}_b^T}{\partial y} v^E) H + \mathbf{N}_b \exp(\alpha \frac{\lambda \text{trace}(\boldsymbol{\tau})}{\eta_p}) \mathbf{N}_b^T) d\Omega_E \\ &- \int_{\Omega_E} 2(\xi-1)\mathbf{N}_b \lambda_0 (\frac{\partial u^E}{\partial x} + \frac{\partial v^E}{\partial y}) \mathbf{N}_b^T H d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.99)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{\tau H}^E = \left[ \mathbf{K}_{\tau_{11}H} \quad \mathbf{K}_{\tau_{12}H} \quad \mathbf{K}_{\tau_{22}H} \quad \mathbf{K}_{\tau_{33}H} \right]^T \quad (6.100)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{11}H} &= \int_{\Omega_E} (2\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b\tau_{11}^E \frac{\partial u^E}{\partial x} + \mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{11}}{\partial x} u^E) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b(\lambda_0(\xi-2)\tau_{12}^E \frac{\partial u^E}{\partial y} - 2\eta_p \frac{\partial u^E}{\partial x}) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} (\lambda_0\xi\mathbf{N}_b\tau_{12} \frac{\partial v}{\partial x} + \mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{11}}{\partial y} v) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.101)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{12}H}^E &= \int_{\Omega_E} (\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b\tau_{12}^E \frac{\partial u^E}{\partial x} + \mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{12}}{\partial x} u^E) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b \left( \frac{1}{2} \lambda_0 (\xi\tau_{11}^E + (\xi-2)\tau_{22}^E) \frac{\partial u^E}{\partial y} - \eta_p \frac{\partial u^E}{\partial y} \right) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} (\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b\tau_{12} \frac{\partial v}{\partial y} + \mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{12}}{\partial y} v) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b \left( \frac{1}{2} \lambda_0 ((\xi-2)\tau_{11} + \xi\tau_{22}) \frac{\partial v}{\partial x} - \eta_p \frac{\partial v}{\partial x} \right) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.102)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{22}H}^E &= \int_{\Omega_E} (\lambda_0\xi\mathbf{N}_b\tau_{12} \frac{\partial u^E}{\partial y} + \mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{22}}{\partial x} u^E) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} (\lambda_0(\xi-2)\mathbf{N}_b\tau_{12}^E \frac{\partial v^E}{\partial x} + \mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{22}}{\partial y} v^E) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} \mathbf{N}_b(2\lambda_0(\xi-1)\tau_{22}^E \frac{\partial v^E}{\partial y} - 2\eta_p \frac{\partial v^E}{\partial x}) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.103)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\tau_{33}H}^E &= \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{33}}{\partial x} u^E - 2\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b\tau_{33}^E \frac{\partial u^E}{\partial x} + 2\mathbf{N}_b\eta_p \frac{\partial u^E}{\partial x}) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \\ &+ \int_{\Omega_E} (\mathbf{W}\lambda_0 \frac{\partial \tau_{33}}{\partial y} v^E - 2\lambda_0(\xi-1)\mathbf{N}_b\tau_{33}^E \frac{\partial v^E}{\partial y} + 2\mathbf{N}_b\eta_p \frac{\partial v^E}{\partial x}) \mathbf{N}_b^T d\Omega_E \end{aligned} \quad (6.104)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{dv}^E = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{d_{11}u}^E & \mathbf{K}_{d_{11}v}^E \\ \mathbf{K}_{d_{12}u}^E & \mathbf{K}_{d_{12}v}^E \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}_{d_{22}v}^E \\ \mathbf{K}_{d_{33}u}^E & \mathbf{K}_{d_{33}v}^E \end{bmatrix} \quad (6.105)$$

$$\mathbf{K}_{d_{11}u}^E = \mathbf{K}_{d_{11}v}^E = \mathbf{K}_{d_{33}u}^E = \int_{\Omega_E} N_b \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} d\Omega_E, \quad \mathbf{K}_{d_{12}u}^E = \frac{1}{2} \int_{\Omega_E} N_b \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} d\Omega_E, \quad (6.106)$$

$$\mathbf{K}_{d_{12}v}^E = \frac{1}{2} \int_{\Omega_E} N_b \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial x} d\Omega_E, \quad \mathbf{K}_{d_{22}v}^E = \mathbf{K}_{d_{33}v}^E = \int_{\Omega_E} N_b \frac{\partial \mathbf{N}_q^T}{\partial y} d\Omega_E$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{dd}^E = \text{diag}(\mathbf{K}_{d_{11}d_{11}}^E, \mathbf{K}_{d_{12}d_{12}}^E, \mathbf{K}_{d_{22}d_{22}}^E, \mathbf{K}_{d_{33}d_{33}}^E) \quad (6.107)$$

$$\mathbf{K}_{d_{11}d_{11}}^E = \mathbf{K}_{d_{12}d_{12}}^E = \mathbf{K}_{d_{22}d_{22}}^E = \mathbf{K}_{d_{33}d_{33}}^E = \int_{\Omega_E} N_b N_b^T d\Omega_E \quad (6.108)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{Te}^E = \int_{\Omega_E} -\frac{h}{(e^E)^2} (T^E - T_e) N_q N_q^T d\Omega_E \quad (6.109)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{Tu}^E = \int_{\Omega_E} \rho C_p \frac{\partial T^E}{\partial x} N_q N_q^T d\Omega_E, \quad \tilde{\mathbf{K}}_{Tv}^E = \int_{\Omega_E} \rho C_p \frac{\partial T^E}{\partial y} N_q N_q^T d\Omega_E \quad (6.110)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{TT}^E = \int_{\Omega_E} (\rho C_p N_q u^E \frac{\partial N^T}{\partial x} + \frac{h}{e^E} N_q N_q^T) d\Omega_E \quad (6.111)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{HT}^E = \int_{\Omega_E} ((T_a - T_0) \log(H) + E_a) N_b N_q^T d\Omega_E \quad (6.112)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_{HH}^E = \int_{\Omega_E} \frac{1}{H} ((T_a - T_0)(T^E - T_0)) N_b N_b^T d\Omega_E \quad (6.113)$$

公式 6.67-6.113 给出了刚度矩阵的表示式，而残差矢量  $\mathbf{R}$  的表达式可以直接由公式 6.54 写出，这里我们不再具体赘述。

#### 6.4.5 网格重划分

由于涉及自由表面，我们还需要对方程 6.43 进行求解，以更新薄膜的宽度。采用 SUPG 加权余量法(避免自由表面的不光滑)，方程 6.25 的弱形式可以写为：

$$\int_{\Gamma} (N_q + \frac{\bar{k}\mathbf{v}}{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}} \cdot \nabla N_q) (\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial N_q^T}{\partial x} u^{\Gamma_E} - v^{\Gamma_E}) d\Gamma = 0 \quad (6.114)$$

在计算得到薄膜的宽度之后，我们需要对网格进行重划分以避免畸变。

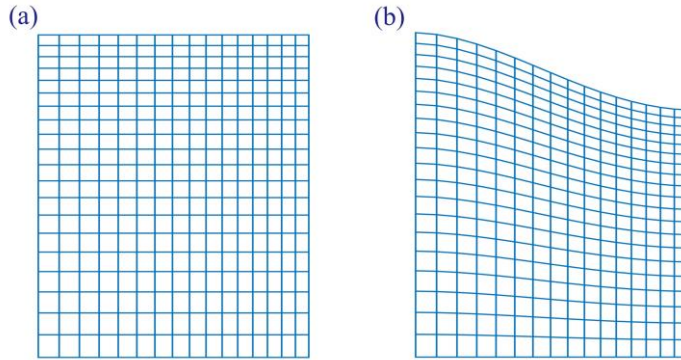


图 6.3 采用 Spines 方法进行网格重划分之前 (a) 以及重划分之后 (b)。

目前已经发展出了多种不同的网格重划分算法，如 Spines 方法<sup>[46]</sup>，Euclidean 方法，Lagrangian 方法，elastic 方法等。结合我们所研究的问题，我们选择了比较简单的 Spines 方法。在该方法中，网格沿着 Spines 重构，Spines 是一维排列



的节点集合，需要给出其初始和最终位置。我们考虑一个 Spines 其末端为  $\mathbf{x}_1$  和  $\mathbf{x}_2$ 。根据 Sines 法则，内部网格节点  $\mathbf{x}_i$  的移动定义为：

$$\delta \mathbf{x}_i = \frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_2|}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|} \delta \mathbf{x}_1 + \frac{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1|}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|} \delta \mathbf{x}_2 \quad (6.115)$$

基于该算法所进行的薄膜流延的网格重划分，如图 6.3 所示。

#### 6.4.6 求解流程与验证

尽管商业化有限元软件 POLYFLOW 可以进行稳态的薄膜流延的计算，但是无法进行动力学稳定性分析。因此，我们基于 MATLAB 自主开发了一套非牛顿流体多场有限元求解器 (PolyLab)，可以处理非牛顿流体的定常和非定常，以及动力学失稳问题。为了与商业软件 POLYFLOW 进行结果对比，我们首先进行了稳态的薄膜流延的模拟。由于该问题的强非线性，因此我们对薄膜的拉伸比采用了渐近算法 (EVOL)，相关的介绍可以参考 POLYFLOW 的用户手册。整个的求解流程如图 6.4 所示。

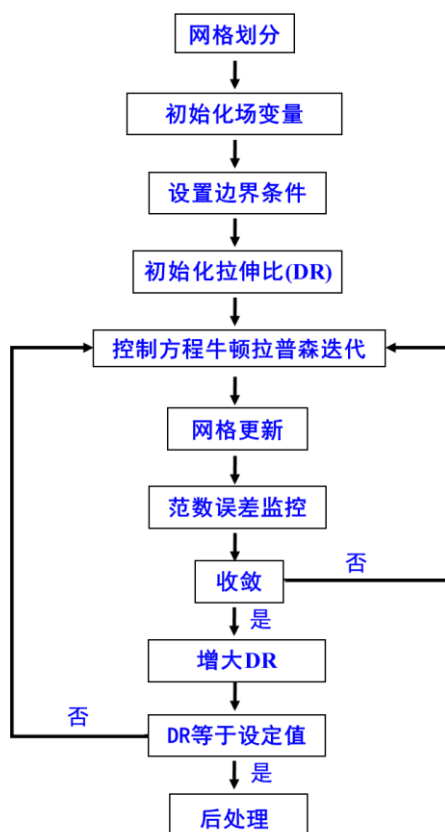


图 6.4 以渐近算法实施的稳态薄膜流延算法流程图。

在完全相同的计算参数和网格设置下，我们对比了商业软件与我们的程序

PolyLab 的稳态薄膜流延的计算结果-速度、温度和厚度云图，如图 6.5 和 6.6 所示。从图上可以直观的看出，我们的求解器计算的云图结果与商业软件结果基本一致。此外，薄膜的缩幅经过计算分别为 3.1964 cm (POLYFLOW) 和 3.1922 cm (PolyLab)。因此，我们求解器的正确性和数值精度可以得到验证。

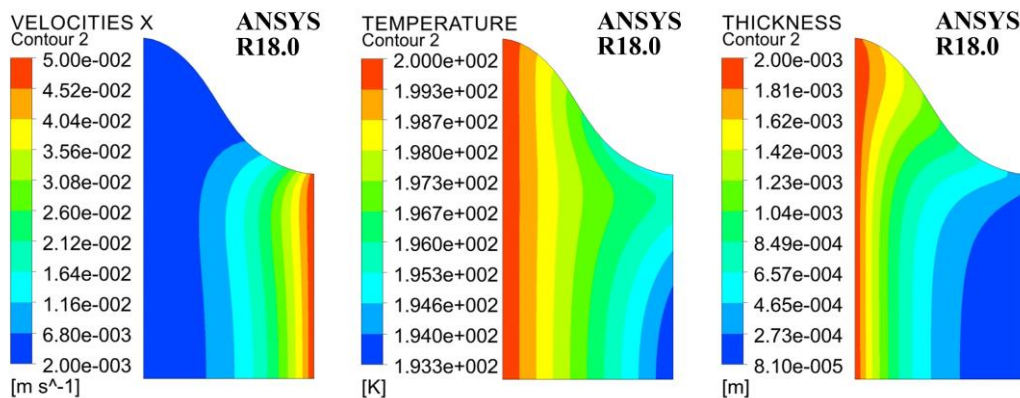


图 6.5 ANSYS POLYFLOW 18.0 的薄膜流延的模拟结果。

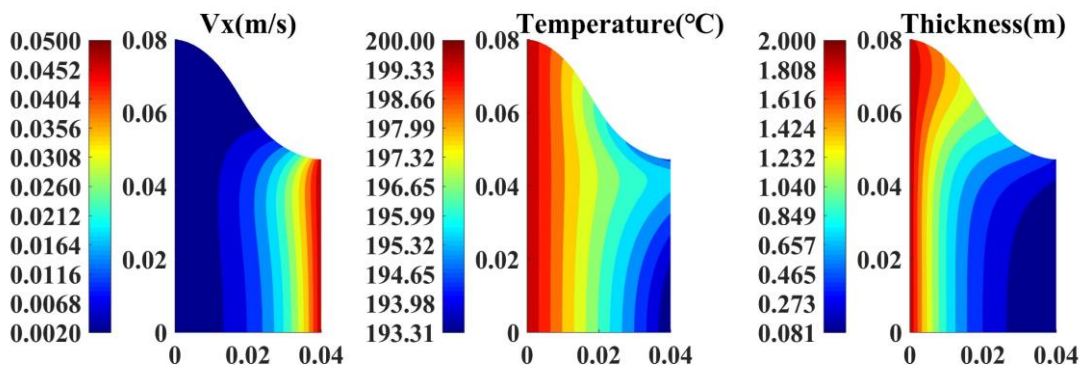


图 6.6 自主开发求解器 PolyLab 的稳态薄膜流延计算结果。

## 6.5 小结

本章我们首先简单介绍了流体的三个基本守恒方程（N-S 方程），即连续性方程，运动方程，以及能量守恒方程。讨论了一些常用的非牛顿流体的本构模型包括广义牛顿以及更真实的粘弹性模型（微分粘弹性和积分粘弹性模型），以及这些模型的一般使用说明。为了清楚的演示非牛顿流体的数值实施，我们以多物理场耦合（流场，速度差，应力场，温度场等）的非等温聚合物薄膜流延为案例，详细阐述了从膜模型控制方程的建立到时间空间离散的推导，非线性方程组的线性化，以及包含自己表面的网格重划分的整个过程。此外，我们也给出了稳态计算的基本操作流程，并展示了我们自主开发的求解器（我们称之为 PolyLab）与

商业软件 ANSYS POLYFLOW 的结果对比，我们发现，它们在稳态下的结果吻合的很好。基于该数值实施案例，我们采用自主开发的求解器进行了薄膜流延的非线性稳定性分析 (商业软件无法实现的扰动非线性失稳)，分析了加工以及流变参数对稳定性的影响，相关的结果与讨论将在下一章节给出。

## 参考文献

- [1] Rivlin RS. Hydrodynamics of Non-Newtonian Fluids[J]. *Nature*, 1947, 160: 611-611.
- [2] Oldroyd JG. On the formulation of rheological equations of state[J]. *Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical Physical Sciences*, 1950, 200: 523-541.
- [3] Lodge A. On the use of convected coordinate systems in the mechanics of continuous media. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*[C]. Cambridge University Press; 1951: 575-584.
- [4] Barnes H, Walters K. On the flow of viscous and elastico-viscous liquids through straight and curved pipes[J]. *Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical Physical Sciences*, 1969, 314: 85-109.
- [5] Tanner R. Some methods for estimating the normal stress functions in viscometric flows[J]. *Transactions of the Society of Rheology*, 1970, 14: 483-507.
- [6] Pipkin A, Tanner R. A survey of theory and experiment in viscometric flows of viscoelastic liquids. *Mechanics today*[M]. Elsevier; 1974: 262-321.
- [7] Bird RB, Armstrong RC, Hassager O. Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics[J]. 1987.
- [8] Walters K, Webster M. On dominating elastico-viscous response in some complex flows[J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A, Mathematical Physical Sciences*, 1982, 308: 199-218.
- [9] Griffiths D, Jones D, Walters K. A flow reversal due to edge effects[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1969, 36: 161-175.
- [10] Griffiths D, Walters K. On edge effects in rheometry[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1970, 42: 379-399.
- [11] Davies DJ, Walters K. The Behaviour of Non-Newtonian Lubricants in Journal Bearings: A Theoretical Study: Department of Applied Mathematics, 1972.
- [12] Owens RG, Phillips TN. Computational rheology: Imperial college press London, 2002.
- [13] Keunings R. On the high Weissenberg number problem[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1986, 20: 209-226.
- [14] Fattal R, Kupferman R. Time-dependent simulation of viscoelastic flows at high Weissenberg number using the log-conformation representation[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2005, 126: 23-37.
- [15] Hulsen MA, Fattal R, Kupferman R. Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high Weissenberg number: stabilized simulations using matrix logarithms[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2005, 127: 27-39.
- [16] Renardy M. On the high Weissenberg number limit of the upper convected Maxwell fluid[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2010, 165: 70-74.
- [17] Migler KB, Son Y, Qiao F, Flynn K. Extensional deformation, cohesive failure, and boundary

- conditions during sharkskin melt fracture[J]. *Journal of Rheology*, 2002, 46: 383-400.
- [18] Koopmans R, Den Doelder J, Molenaar J. *Polymer melt fracture*[M]. CRC Press, 2010.
- [19] Larson RG, Shaqfeh ES, Muller SJ. A purely elastic instability in Taylor–Couette flow[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1990, 218: 573-600.
- [20] Larson RG. Instabilities in viscoelastic flows[J]. *Rheologica Acta*, 1992, 31: 213-263.
- [21] Barnes HA, Hutton JF, Walters K. *An introduction to rheology*[M]. Elsevier, 1989.
- [22] Lenk RS. *Polymer rheology*[M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [23] Wang S-Q. *Nonlinear polymer rheology*[M]. Wiley Online Library, 2018.
- [24] Anderson JD, Wendt J. *Computational fluid dynamics*[M]. Springer, 1995.
- [25] Chung T. *Computational fluid dynamics*[M]. Cambridge University Press, 2010.
- [26] Ostwald W. About the rate function of the viscosity of dispersed systems[J]. *Kolloid Z*, 1925, 36: 99-117.
- [27] Carreau PJ, MacDonald IF, Bird RB. A nonlinear viscoelastic model for polymer solutions and melts-II[J]. *Chemical Engineering Science*, 1968, 23: 901-911.
- [28] Cross MM. Rheology of non-Newtonian fluids: a new flow equation for pseudoplastic systems[J]. *Journal of colloid science*, 1965, 20: 417-437.
- [29] Waele Ad. The manifestation of interfacial forces in dispersed systems[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1926, 48: 2760-2776.
- [30] Yasuda K, Armstrong R, Cohen R. Shear flow properties of concentrated solutions of linear and star branched polystyrenes[J]. *Rheologica Acta*, 1981, 20: 163-178.
- [31] Zavinska O, Claracq J, van Eijndhoven S. Non-isothermal film casting: Determination of draw resonance[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2008, 151: 21-29.
- [32] Ferry JD. *Viscoelastic properties of polymers*[M]. John Wiley & Sons, 1980.
- [33] Thien NP, Tanner RI. A new constitutive equation derived from network theory[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1977, 2: 353-365.
- [34] Phan - Thien N. A nonlinear network viscoelastic model[J]. *Journal of Rheology*, 1978, 22: 259-283.
- [35] Giesekus H. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1982, 11: 69-109.
- [36] Bird R, Dotson P, Johnson N. Polymer solution rheology based on a finitely extensible bead-spring chain model[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1980, 7: 213-235.
- [37] McLeish T, Larson R. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer[J]. *Journal of Rheology*, 1998, 42: 81-110.
- [38] McLeish TCB, Larson RG. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer[J]. *Journal of Rheology*, 1998, 42: 81-110.
- [39] Verbeeten WMH, Peters GWM, Baaijens FPT. Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom–Pom model[J]. *Journal of Rheology*, 2001, 45: 823-843.
- [40] Clemeur N, Rutgers R, Debbaut B. Numerical simulation of abrupt contraction flows using the

- Double Convected Pom-Pom model[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2004, 117: 193-209.
- [41] Clemeur N, Debbaut B. A pragmatic approach for deriving constitutive equations endowed with pom-pom attributes[J]. *Rheologica Acta*, 2007, 46: 1187-1196.
- [42] Papanastasiou A, Scriven L, Macosko C. An integral constitutive equation for mixed flows: viscoelastic characterization[J]. *Journal of Rheology*, 1983, 27: 387-410.
- [43] De Gennes P-G, Gennes P-G. *Scaling concepts in polymer physics*: Cornell university press, 1979.
- [44] Doi M, Edwards SF. *The theory of polymer dynamics*[M]. Oxford University Press, 1988.
- [45] Silagy D, Demay Y, Agassant JF. Study of the stability of the firm casting process[J]. *Polymer Engineering and Science*, 1996, 36: 2614-2625.
- [46] d'Halewyu S, Agassant JF, Demay Y. Numerical simulation of the cast film process[J]. *Polymer Engineering & Science*, 1990, 30: 335-340.
- [47] Rajagopalan D, Armstrong RC, Brown RA. Calculation of steady viscoelastic flow using a multimode Maxwell model: application of the explicitly elliptic momentum equation (EEME) formulation[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1990, 36: 135-157.
- [48] Guénette R, Fortin M. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1995, 60: 27-52.
- [49] Brooks AN, Hughes TJ. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations[J]. *Computer methods in applied mechanics engineering fracture mechanics*, 1982, 32: 199-259.
- [50] Marchal J, Crochet M. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1987, 26: 77-114.
- [51] Fortin M, Fortin A. A new approach for the FEM simulation of viscoelastic flows[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1989, 32: 295-310.

## 第 7 章 非等温薄膜流延的非线性稳定性分析

### 7.1 引言

挤出薄膜流延 (EFC) 是工业上重要的聚合物薄膜加工方法之一, 聚合物熔体在恒定温度下连续挤出, 然后由牵引辊拉伸, 在不同温度下吹入热风来控制热流<sup>[1-4]</sup>。空气间隙, 即从口模到第一个流延辊之间的区域 (见图 6.2), 是 EFC 的研究重点<sup>[5-11]</sup>。在这一区域内, 大量有趣的流动现象频繁发生, 如缩颈现象、边缘翘曲效应、拉伸共振不稳定等<sup>[12-15]</sup>, 其对加工效率和最终成膜产品的均匀性有显著影响。在空气间隙中出现的缩颈现象和边缘翘曲效应是很常见的。Doborth 和 Erwin<sup>[12]</sup>首先对它们进行了实验和理论研究。拉伸共振不稳定性是拉伸比接近临界值时薄膜宽度和厚度的周期性振荡。它是最常见的不稳定现象之一, 不仅在薄膜流延中, 而且在纤维纺丝和吹膜中也经常发生<sup>[16-21]</sup>。由于薄膜流延的关键问题是如何在连续加工过程中保持薄膜产品的均匀性, 因此必须深入了解薄膜流延的非线性动力学和稳定性。

在已经报道的工作中应用的模型主要是牛顿模型或简单的粘弹性模型, 例如 Maxwell 模型<sup>[22, 23]</sup>, 它们用于模拟复杂的聚合物熔体来说是不够精确的。我们注意到, 粘弹性的 PTT 模型是最真实的流变模型之一, 其已成功地应用于薄膜流延的仿真。Shiromoto 等人<sup>[24]</sup>已采用多模态 PTT 模型来研究粘弹性对薄膜流延的影响。他们的仿真结果与实验吻合得很好, 证实了 PTT 模型的可靠性。值得一提的是 Hyun 及其同事的工作<sup>[25-28]</sup>, 他们首次采用了无量纲的 PTT 本构方程来进行薄膜流延的稳定性分析。在他们的工作中, 介绍了两组具有不同特性的聚合物, 即拉伸增稠材料 (例如 LDPE) 和拉伸变稀材料 (如 HDPE), 它们对加工条件的敏感性不同。还详细讨论了  $De$ ,  $AR$  和对流传热系数对薄膜流延稳定性的影响, 这表明 PTT 模型能够在薄膜流延的不稳定模拟中体现出聚合物的粘弹性。最近, 一个名为 Pom-Pom 的分子本构方程引起了人们的广泛关注。McLeish 和 Larson<sup>[29]</sup>引入的原始 Pom-Pom 模型主要用于模拟长链支化聚合物熔体 LDPE 的流变行为。基于一个扩展的 Pom-Pom (XPP) 模型<sup>[30]</sup>, Pol<sup>[15]</sup>和 Mzatloukal 等人<sup>[31]</sup>研究了聚合物链构象对流延膜缩颈现象的影响。但是, 很遗憾, 在文献中尚未报道使用诸如 XPP 模型的分子本构模型对流延膜的稳定性进行分析。这可能是由于数值计算的复杂性。

本章, 我们对薄膜流延的稳定性以及动力学进行了全面而深入的探讨。考虑到良好的性能和准确性, 我们选择 PTT 模型来描述材料的流变行为。稳定化技术 (DEVSS, SUPG) 首先被引入到二维薄膜模型中<sup>[32]</sup>, 这被证明可以提高瞬态

非等温膜流延数值算法的鲁棒性<sup>[33-36]</sup>。在较宽的参数空间中进一步研究了薄膜流延的非线性动力学和稳定性。结果表明，加工参数（如  $AR$ ）对薄膜流延过程的稳定性具有单调的影响。通过解耦  $De$ ，证实了挤出速率和松弛时间对流动稳定性的影响是等效的。在缺乏相关研究的情况下，我们对拉伸流变行为，特别是单轴拉伸粘度对 PTT 参数的敏感性进行了深入的研究。结合拉伸流变行为和稳定性分析，我们发现单轴伸长粘度在薄膜流延稳定性中起主要作用，这也为冷却效应对稳定性的影响提供了新的解释。

## 7.2 材料参数

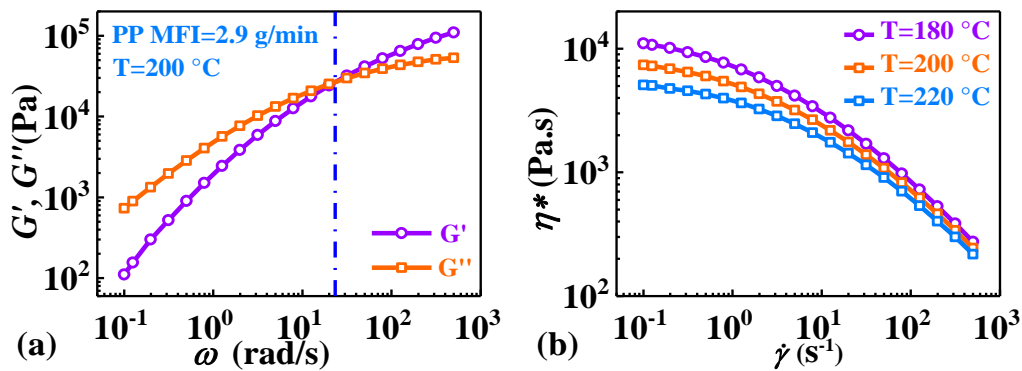


图 7.1 (a) 储存( $G'$ )和损耗( $G''$ )模量在  $200^\circ\text{C}$  时的主曲线; (b) 从  $180 \sim 220^\circ\text{C}$  的复数粘度  $\eta^*$ 。

为了获得更真实的材料参数输入(如松弛时间)，我们以一种等规聚丙烯(iPP)材料为参考(由中国扬子石化公司提供)。其熔体流动指数为  $2.9 \text{ g}/10 \text{ min}$  ( $200^\circ\text{C}$ ,  $2.16 \text{ kg}$  加载)。利用 ARES-G2 (TA 仪器) 旋转流变仪，在  $180 \sim 220^\circ\text{C}$  不同的温度下进行了小振幅振荡剪切 (SAOS) 测试，获得了 iPP 熔体的线性粘弹性特性。在参考温度为  $200^\circ\text{C}$  时，熔体的储存模量 ( $G'$ ) 和损耗模量 ( $G''$ ) 如图 7.1(a) 所示。由 Cox-Merz 规则<sup>[37]</sup>得到的复数粘度如图 7.1(b) 所示。模拟过程中采用的工艺条件和材料参数值如表 1 所示。

表 1. 当前模拟中所用的薄膜流延的加工条件以及材料参数。

Parameters	Values(unit)
空气间隙, $L_0$	0.04 m
半口模宽度, $W_0$	0.08 m
口模间隙, $e_0$	0.002 m
挤出速率, $v_{in}$	0.002 m/s
口模温度, $T_\alpha$	473.15 K



环境温度, $T_e$	293.15 K
密度, $\rho$	902 Kg/m <sup>3</sup>
比热, $C_p$	2900 J/(Kg K)
活化能, $E_a$	37 KJ/mol
零剪切粘度, $\eta_0$	8102 Pa·s
松弛时间, $\lambda_0$	0.04 s
传热系数, $h$	10 W/(m <sup>2</sup> K)
PTT 模型参数, $\alpha$	0.015
PTT 模型, $\xi$	0.6

二维的几何模型 ( $L_0 \times W_0$ ) 在第六章的图 6.2 给出。模拟中所用的终端松弛时间  $\lambda_0 = 0.04$  s 由  $G'$  和  $G''$  曲线交点对应的频率的倒数确定。关于传热系数  $h$  的计算可以参考 Zavinska 等人的工作<sup>[3]</sup>。PTT 模型参数  $\alpha$  和  $\xi$  采用 Lee 等人的设置<sup>[38]</sup>。其余参数为 iPP 的基本材料参数。此外, 有几点需要注意: 首先, 多模态模型可以更准确地预测聚合物熔体的流变行为。但是, 聚合物熔体的流动不稳定性通常在大应变速率下发生, 当采用较长的松弛时间模式时, 现有的数值算法很容易失败<sup>[39]</sup>。其次, 由于拉伸特性在薄膜流延过程中起着主导作用, 因此单模态的 PTT 模型就可以定性地预测拉伸行为。第三, 对于与时间有关的流动问题, 多模式模型的计算成本非常高<sup>[40]</sup>。基于以上几点考虑, 本文采用单模 PTT 模型, 在今后的工作中我们将采用多模态模型。

## 7.3 模型

### 7.3.1 数值模型

首先, 我们仍然给出基本的控制方程:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot e\mathbf{v} = 0 \\ \nabla \cdot e(\boldsymbol{\tau} + 2\eta_0\mathbf{D} - 2\eta_p\mathbf{d}) = 0 \\ \rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T \right) = -\frac{2h}{e} (T - T_e) \\ \exp\left[ \frac{\alpha\lambda}{\eta_p} \text{tr}(\boldsymbol{\tau}) \right] \boldsymbol{\tau} + \lambda \left[ \left(1 - \frac{\xi}{2}\right) \nabla \boldsymbol{\tau} + \frac{\xi}{2} \Delta \boldsymbol{\tau} \right] = 2\eta_p \mathbf{D} \\ H(T) = \exp\left[ \frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T - T_0} - \frac{1}{T_a - T_0} \right) \right] \\ \frac{\partial w}{\partial t} + v_x \frac{\partial w}{\partial x} = v_y \end{array} \right. \quad (7.1)$$

这里需要指出的是,关于方程 7.1 的具体的求解以及数值推导可以参考上一章节。这里我们只简单总结下相关的数值求解。首先,所有求解过程均在 MATLAB 中实现,刚度组装采用稀疏并行格式,子程序编译为 C++动态链接库,从而大幅提高了计算效率。在运动学方程中引入了 SUPG 算法,以追踪光滑变形的自由边界 [36]。本构方程中采用 SU 算法来处理对流占优的难题<sup>[41]</sup>。为了避免高 Weissenberg 数时的数值失败,利用 DEVSS 算法在动量方程中引入了椭圆算子<sup>[33,36]</sup>,这极大地提高了数值稳定性。此外,具有二次收敛的牛顿-拉普森迭代被用于非线性方程组的求解。考虑到瞬态问题,一个隐式 Euler 法被用于时间离散并充分考虑时间步长和网格收敛性的影响。

### 7.3.3 PTT 模型拉伸流变行为

拉伸流变性质,特别是单轴拉伸粘度( $\eta_E$ )显著影响聚合物薄膜流延的稳定性。然而,它们之间具体的关系目前仍然是不清楚的。因此,我们首先从本构模型上探讨了材料参数对  $\eta_E$  的影响。在稳态单轴拉伸情况下, $\eta_E$  可以通过如下的式 7.2-7.4 计算:

$$\eta_E(\dot{\varepsilon}) = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\varepsilon}} \quad (7.2)$$

$$2\dot{\varepsilon}\lambda(\xi-1)\tau_{11} + \tau_{11}\exp\left(\frac{\alpha\lambda}{\eta_p}(\tau_{11} + 2\tau_{22})\right) = 2\eta_p\dot{\varepsilon} \quad (7.3)$$

$$\dot{\varepsilon}\lambda(1-\xi)\tau_{22} + \tau_{22}\exp\left(\frac{\alpha\lambda}{\eta_p}(\tau_{11} + 2\tau_{22})\right) = -\eta_p\dot{\varepsilon} \quad (7.4)$$

其中偏应力分量  $\tau_{11}$  和  $\tau_{22}$  可以通过式 7.3 和 7.4 的不动点迭代求得,相关的算法我们采用了 MATLAB 编程。图 7.2 (a) 和 (b) 首先描述了  $\eta_E$  对非线性材料参数  $\alpha$  和  $\xi$  的敏感性。随着  $\alpha$  的增加,聚合物熔体的流变特性经历了从拉伸增稠到拉伸变稀的演变过程。而拉伸增稠随着  $\xi$  的增加而逐渐减弱并延迟。实际上,在真实的薄膜流延过程中,拉伸应变速率 ( $\dot{\varepsilon}$ ) 一般在 0 到  $100 \text{ s}^{-1}$  之间。根据我们的模拟结果, $\dot{\varepsilon}$  的最大值大约为  $20 \text{ s}^{-1}$ 。因此对于薄膜流延来说,图 7.2 中蓝色虚线左侧是最有趣的区域。图 7.2(c) 表明在所感兴趣的区域内, $\alpha$  对  $\eta_E$  的影响比  $\xi$  更加显著。松弛时间 ( $\lambda$ ) 对  $\eta_E$  的影响如图 7.2(d) 所示。显然,随着  $\lambda$  的增加, $\eta_E$ - $\dot{\varepsilon}$  曲线向低  $\dot{\varepsilon}$  处平移。考虑到粘度和松弛时间对温度的依赖性,图 7.2(e) 表明  $\eta_E$  随着温度的降低而增加。

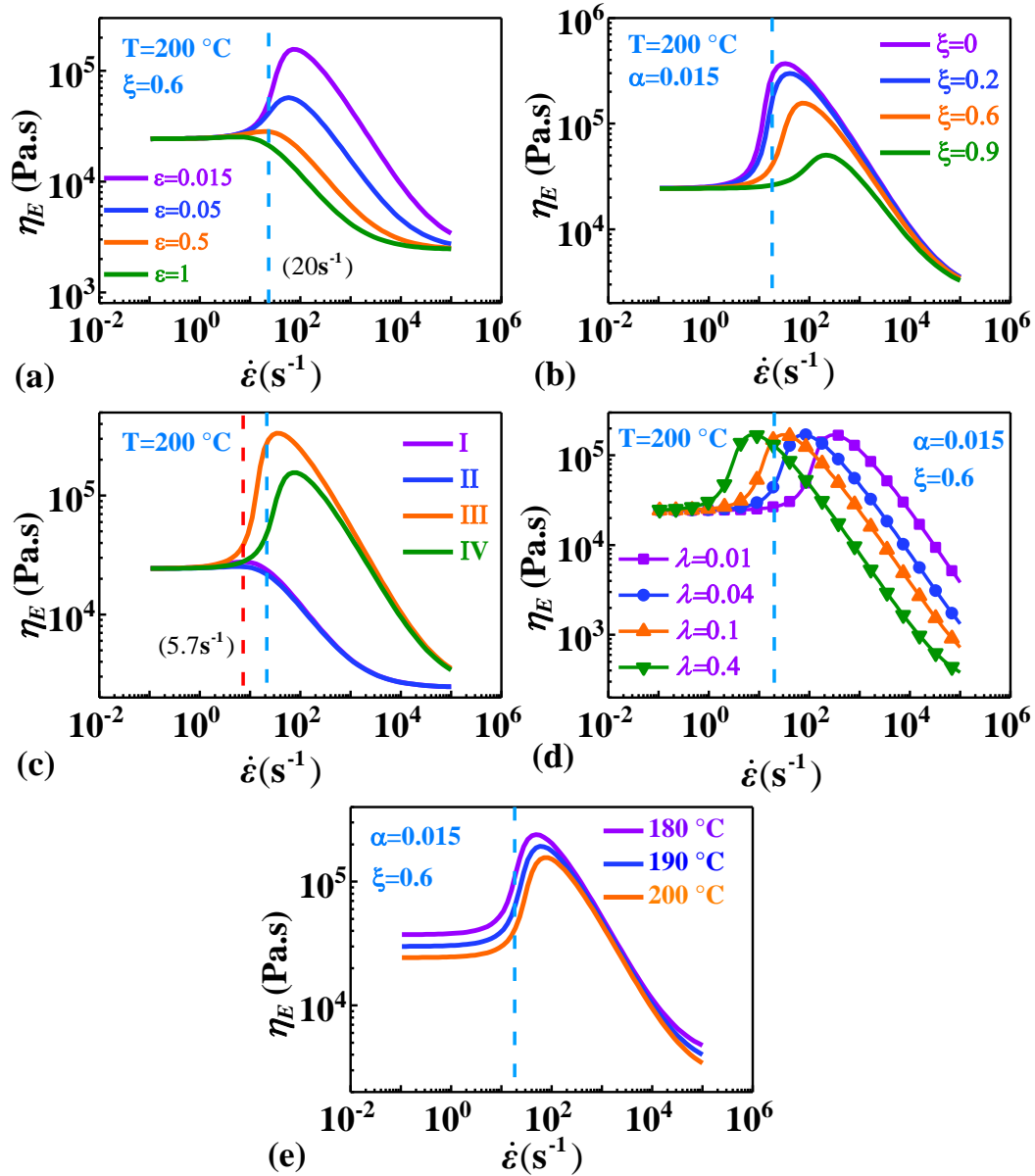


图 7.2. 由 PTT 模型描述的单轴拉伸粘度。(a) 参数  $\alpha$  对  $\eta_E$  的影响。(b) 参数  $\xi$  对  $\eta_E$  的影响。(c) 两个参数  $\alpha$  和  $\xi$  对  $\eta_E$  的比较 (I:  $\alpha=0.5$ ,  $\xi=0.1$ ; II:  $\alpha=0.5$ ,  $\xi=0.6$ ; III:  $\alpha=0.015$ ,  $\xi=0.1$ ; IV:  $\alpha=0.015$ ,  $\xi=0.6$ )。 (d) 松弛时间对  $\eta_E$  的影响。(e) 温度对  $\eta_E$  的影响 ( $\eta_p = 7291.8\text{ Pa}\cdot\text{s}$ )。

## 7.4 结果与讨论

### 7.4.1 加工参数的影响

当拉伸比 ( $Dr$ ) 达到临界值 ( $Dr_c$ ) 时发生的拉伸共振失稳被认为是流动不稳定性发生的标志。我们跟踪在收卷点中心线处的薄膜宽度 ( $w$ ) 和厚度 ( $e$ ) 的响应, 以确定  $Dr_c$ 。在图 7.3 (a) 中, 给出了三个逐渐增加的  $Dr$  的膜宽-时间曲

线。所需参数根据表 I 进行设置，此外，对流传热系数 ( $h$ ) 被设置为零，以便排除薄膜冷却的影响。显然，对于高于  $Dr_c$  的  $Dr = 32$ ，膜宽度的初始扰动会随着时间逐渐增大，并最终形成振幅恒定的持续周期振荡。当  $Dr = 15$  低于  $Dr_c$  时，初始扰动表现为阻尼振荡，最终达到稳态。特别是，当  $Dr$  接近  $Dr_c$  (约 24) 时，膜宽度的响应是简单的谐波振荡，表明不稳定性的开始 (霍普夫分岔)。在图 4(b) 中，同时显示了短时间内膜厚度和宽度的周期性振荡。这两个状态变量具有固定的相位差，并且具有 12.4 s 的相同周期。此外，根据非线性系统动力学的描述，拉伸共振是典型的 Hopf 分岔现象，对应于周期性振荡失稳。对于  $Dr = 32$ ，膜的宽度和厚度的相空间轨迹在图 7.3 (c) 和 (d) 中给出。显然，相位图从焦点开始顺时针增长，并最终形成极限环。

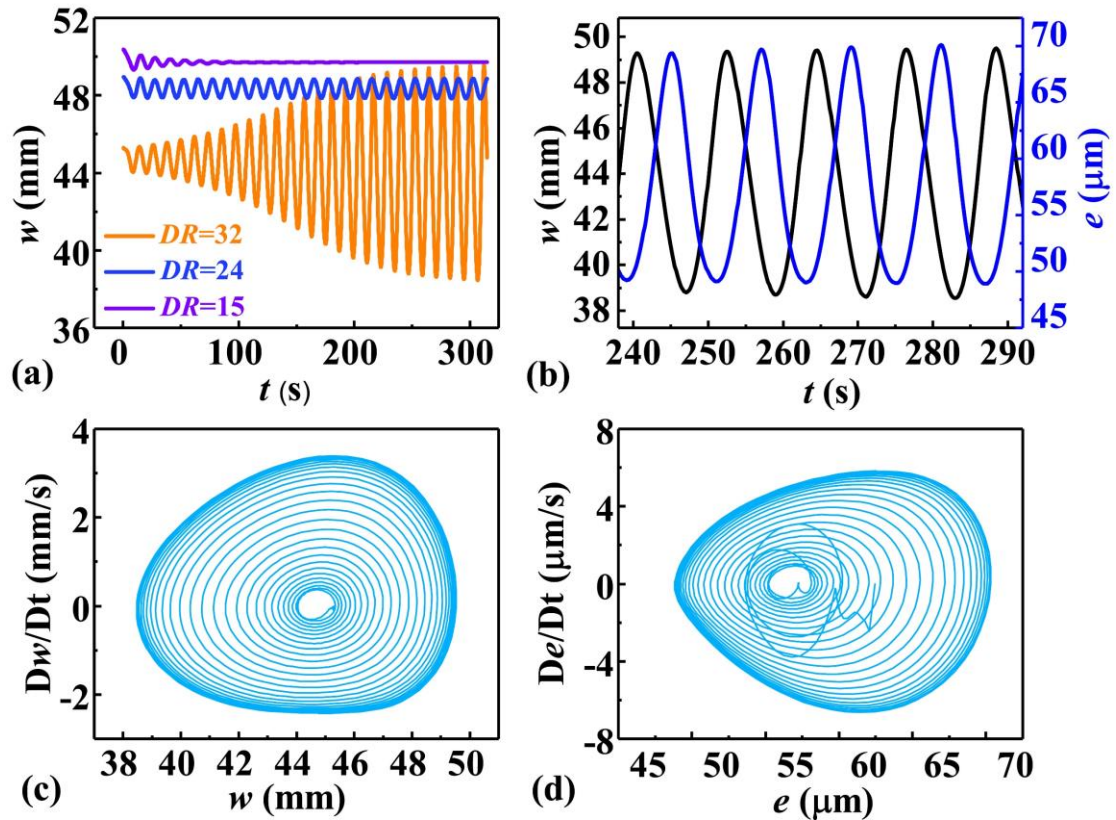


图 7.3 拉伸比  $Dr$  对薄膜流延稳定性的影响。(a)不同  $Dr$  薄膜宽度的演化。(b)薄膜宽度和厚度的振荡相位和周期。(c)薄膜宽度的相空间轨迹。(d)薄膜厚度的相空间轨迹 ( $\alpha = 0.015$ ,  $\xi = 0.6$ ,  $v_{in} = 0.002$  m/s,  $L = L_0$ ,  $W = W_0$ )。

利用上述方法，我们首先研究了三种不同对流换热系数  $0$   $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$ ， $10$   $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$ ， $50$   $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$  下冷却对流延稳定性的影响。后两个  $h$  值下的二维温度场等值线图如图 7.4 所示。从模具到收卷辊，温度逐渐降低，模具与收卷辊之间的温度降从  $6.7$   $^\circ\text{C}$  增加到  $29.6$   $^\circ\text{C}$  随着  $h$  从  $10$   $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$  到  $50$   $\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$ 。这

三种不同的对流换热系数对膜宽随时间的变化的影响规律如图 7.5(a)所示。显然， $h$  值的增加显著降低了拉伸共振的幅度。注意到，Jae 等人<sup>[42, 43]</sup>研究了两种流体流动稳定性的差异，即拉伸增稠（当前模拟中  $\alpha \leq 0.1, \alpha = 0.015, \xi = 0.1$ ）和拉伸变稀（当前模拟中  $\alpha \geq 0.2, \alpha = 0.5, \xi = 0.6$ ）。为了进一步研究  $h$  对这两种流体稳定性的影响， $Drc$  随  $h$  从 0 到  $100 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  的演变如图 7.5(b)所示。从图上可以看出，无论流体的拉伸流变特性如何，增加  $h$  都可以改善流动稳定性。有趣的是，与拉伸变稀熔体相比，拉伸增稠熔体随着  $h$  的增加表现出更好的稳定性，特别是当  $h$  大于  $50 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  时。

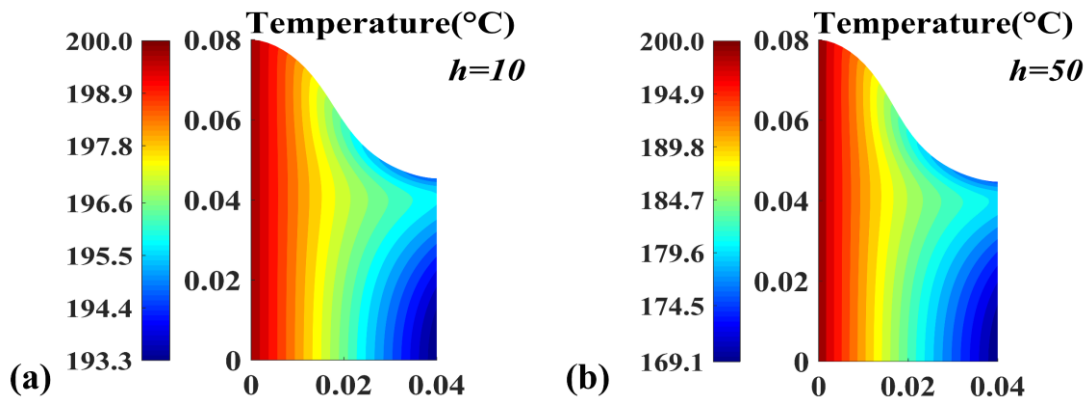


图 7.4 在  $h = 10 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  (a)和  $h = 50 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  (b)的二维温度场等值线图。

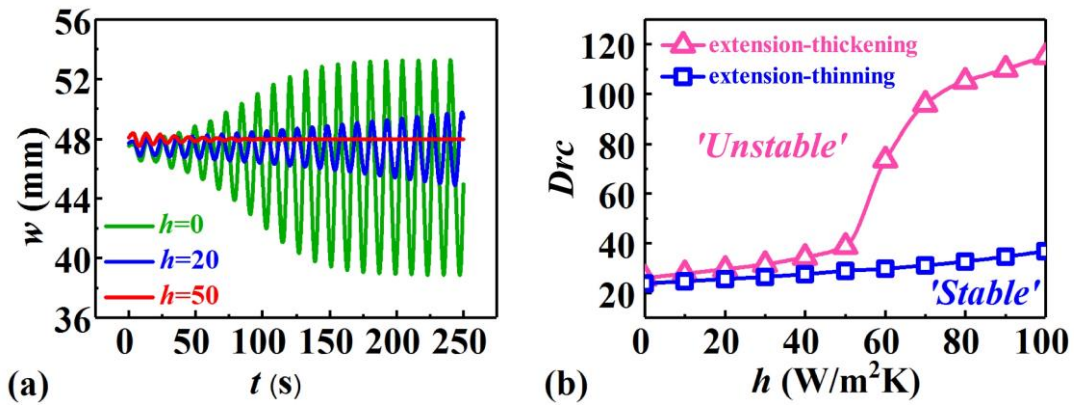


图 7.5 (a)薄膜宽度在三个热交换系数的演化( $\alpha = 0.015, \xi = 0.6, v_{in} = 0.002 \text{ m/s}, Dr = 32, L = L_0, W = W_0$ )。 (b)两种不同类型的流体(拉伸增稠和拉伸变稀)的  $Drc$  随  $h$  的演化。

尽管之前已经有很多文献报道了  $De = \lambda_0 v_{in} / L_0$  对加工稳定性的影响<sup>[18, 42, 43]</sup>。但是  $v_{in}$  对薄膜稳定性的独立影响的研究仍然是缺乏的。将拉伸共振视为振荡不稳定性，可以考虑哪些变量影响拉伸共振的振荡周期。显然，如图 7.5(a)所示， $h$  (冷却)对振荡周期几乎没有影响。为了回答上述问题， $v_{in}$  对稳定性的影响被进

一步研究。如图 7.6(a)所示, 增加  $v_{in}$  导致振荡周期的显著降低。比如,  $v_{in} = 0.002$  m/s 时周期为 12.4s, 而对于  $v_{in} = 0.008$  m/s 则降低至 2.8s。以前的一些研究认为, 在拉伸增稠流体中存在两个  $Drc$ , 分别命名为上  $Drc$  和下  $Drc$ 。但是, 在我们的模拟中, 只观测到一个  $Drc$ 。如图 7.6(b)所示, 对于拉伸增稠或拉伸变稀流体的  $Drc$  在  $v_{in}$  低于 0.007 m/s 时没有明显的区别。但是, 当  $v_{in}$  超过 0.007 m/s 时, 拉伸变稀的流体  $Drc$  逐渐衰减随着  $v_{in}$  的增加。而对于拉伸增稠流体, 其  $Drc$  急剧增加直到  $v_{in}$  为 0.012 m/s。在此之后, 继续增加  $v_{in}$  将导致  $Drc$  的轻微下降。

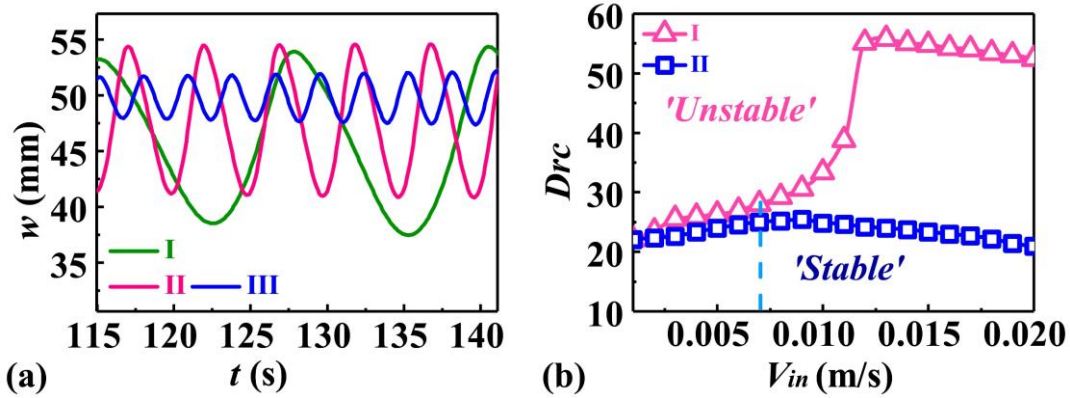


图 7.6 (a) 薄膜宽度随不同  $v_{in}$  的演化: (I)  $v_{in} = 0.002$  m/s ; (II)  $v_{in} = 0.004$  m/s ; (III)  $v_{in} = 0.008$  m/s 。(b) 两种不同流体的  $Drc$  随  $v_{in}$  的演化(I) 拉伸增稠; (II) 拉伸变稀。

纵横比 ( $AR$ ) 定义为  $AR = L_0 / W_0$ , 已经在之前的研究中被广泛的讨论<sup>[42,43]</sup>。 $AR$  对稳定性的影响通过改变空气间隙即  $L_0$ , 这很容易实现。图 7.7 给出了 ( $Drc$ ,  $AR$ ) 的中性稳定曲线。在我们的模拟中,  $Drc$  的两个峰值被观测到, 这跟之前所报道的仅在  $AR = 1$  有一个峰值不同<sup>[23,43]</sup>。为了理解这一现象, 本文介绍了 Kwon 等人<sup>[27]</sup>所定义的平面 (P)、过渡 (T) 和缩颈 (N) 三种变形。三种形变通过流动方向和中心线的驻流时间 ( $\theta_i$ ) 的比值来区分, 其定义为:

$$\theta_i = \frac{\int_0^{L_0} \frac{1}{v_{x,i}} dx}{\int_0^{L_0} \frac{1}{v_{x,1}} dx} \quad (7.5)$$

其中,  $v_{x,1}$  表示中心线处的速度,  $v_{x,i}$  为不同位置的沿流线方向的速度。三种形变所对应的  $\theta_i$  为: P:  $0.99 \leq \theta_i \leq 1$ ; T:  $\theta_i < 0.99$ ; N:  $\theta_i > 1$ 。根据上述定义, 卷取辊处的膜宽分为三个区域 (P、T、N), 其宽度分别为  $W_P$ ,  $W_T$  和  $W_N$ , 如图 7.8(a) 所示。这些形变对应的膜宽在收卷辊处所占的比值可以表示为:

$$Rdt_d = \frac{W_d}{W_{take-up}} \times 100\% \quad (7.6)$$

其中，下表  $d$  表示 P, T, N,  $W_{take-up} = W_P + W_T + W_N$  为收卷辊处的膜宽。

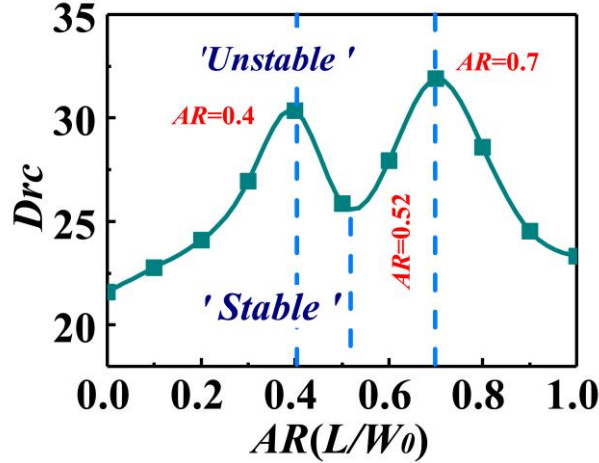


图 7.7 ( $Drc, AR$ ) 的中性稳定曲线 ( $v_{in} = 0.002 \text{ m/s}$ ,  $\alpha = 0.015$ ,  $\xi = 0.6$ ,  $h = 0 \text{ W/(m}^2 \text{ K)}$ )。

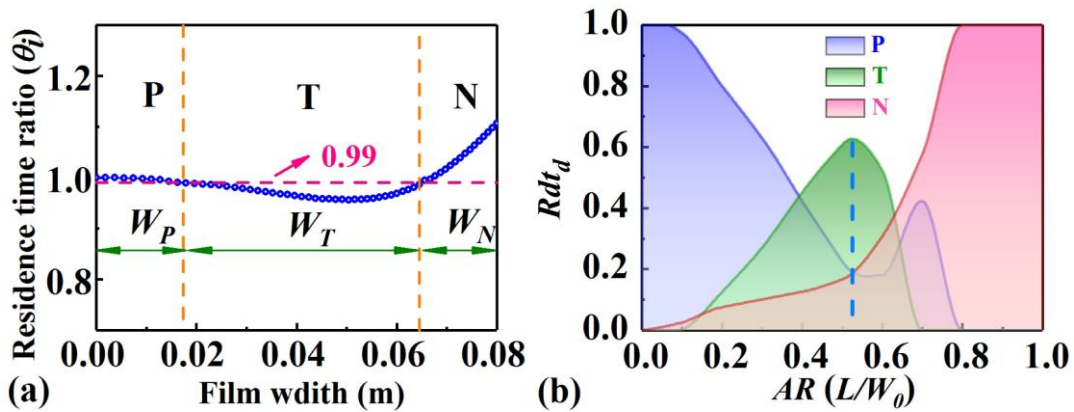


图 7.8 (a) 在收卷点的薄膜宽度  $W_{take-up}$  被分为三个形变区域 ( $AR = 0.52$ )。 (b) 三种变形类型占取点的比值 (平面变形(P); 过渡变形(T); 缩颈变形(N))。

在  $AR$  小于 0.1 时，以 P 变形类型为主， $Rdt_P$  约为 1。随着  $AR$  的增大， $Rdt_P$  先迅速减小，然后在  $AR = 0.52$  时进入平台区。随着  $AR$  值的进一步增大， $Rdt_P$  值在  $AR = 0.7$  处出现一个小高峰，随后在  $AR$  值较大时急剧下降。对于  $Rdt_T$ ，其在  $AR$  值约为 0.1 时出现，在  $AR$  值约为 0.5 时迅速增大到约为 0.6 的最大值。对于  $0.52 \leq AR \leq 0.7$ ，增加  $AR$  导致  $Rdt_T$  逐渐降低到零。而对于  $Rdt_N$ ，增加  $AR$  导致其连续的增加，并在  $AR = 0.7$  开始扮演主要角色。联合图 7.7 和 7.8，可以很容易看出三种变形类型  $Rdt_d$  的相对变化对薄膜流延稳定性有显著影响。

## 7.4.2 拉伸流变参数的影响

由于  $\eta_E$  对参数  $\alpha$  和  $\xi$  比较敏感，一个很自然的想法是分析  $Drc$  对这两个参数的依赖性。图 7.9 展示了参数空间  $0 \leq \alpha \leq 2$  和  $0 \leq \xi \leq 1$  的  $Drc$ 。在保持其他条件不变的情况下，我们观察到  $Drc$  随着  $\xi$  从 0 到 1 缓慢增加，而  $Drc$  对  $\alpha$  的依赖性很小，尤其是当  $\xi$  超过 0.3 时。 $Drc$  对  $\alpha$  和  $\xi$  的依赖性似乎并不一致。但是，考虑到图 7.9 中显示的  $Drc$ ，图 7.2(c) 中红色虚线左侧是我们关注的区域。有趣的是，在此区域内， $Drc$  和  $\eta_E$  对参数  $\alpha$  和  $\xi$  都遵循相同的依赖关系。

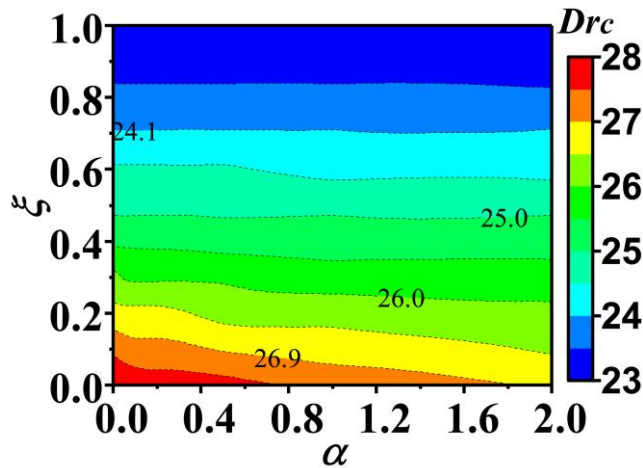


图 7.9  $Drc$  在参数空间  $0 \leq \alpha \leq 2$  和  $0 \leq \xi \leq 1$  的云图 ( $v_{in} = 0.002$  m/s,  $h = 0$  W/(m<sup>2</sup> K))。

根据图 7.2(c)，我们选择曲线 II ( $\alpha = 0.5$ ,  $\xi = 0.6$ ) 和 III ( $\alpha = 0.015$ ,  $\xi = 0.1$ ) 来代表拉伸变稀和拉伸增稠流体。在这两种流体中的松弛时间对流延稳定性的影响如图 7.10 所示。对于拉伸变稀流体(图 7.10(a))， $Drc$  随着  $\lambda$  从 0 到 0.1 s (区域 I) 的增加而缓慢增加到一个最大值约为 25。在这个最大值之后，继续增加  $\lambda$  导致  $Drc$  的下降(区域 II)。有趣的是，相应的  $\eta_E$  随  $\lambda$  的演化与  $Drc$  非常相似。对于拉伸增稠流体(图 7.10(b))， $Drc$  随着  $\lambda$  的演化可以被分为三个区域。在区域 I， $Drc$  随着  $\lambda$  从 0 到 0.08 s 几乎线性的增加。紧随着该线性区， $Drc$  进入非线性急速增长区域(区域 II)，在  $\lambda$  约为 0.22 s 时达到最大值 55 左右。随后，进一步增加  $\lambda$  将使得  $Drc$  逐渐衰减(区域 III)。类似的，在同一张图上， $\eta_E$  也遵循相同的分区。在区域 I 中，增加  $\lambda$  将导致  $\eta_E$  的增加，其在区域 II 中近乎指数的增加到一个最大值约为  $3.2 \times 10^5$  Pa.s。而在区域 III，可以观测到  $\eta_E$  的轻微降低。基于此图，可以认为， $\eta_E$  对薄膜流延的稳定性起着关键的作用。



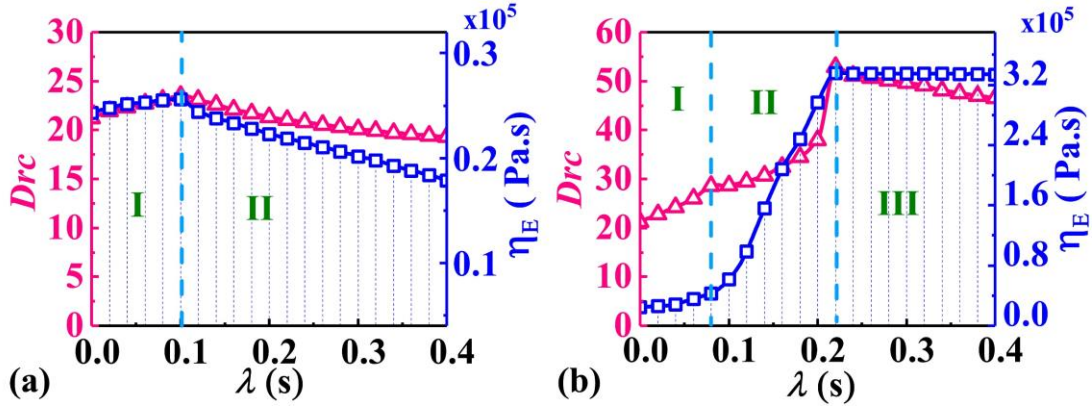


图 7.10 在拉伸变稀 (a) 和拉伸增稠 (b) 流体中  $Drc$  和  $\eta_E$  随  $\lambda$  演化的对比 ( $v_{in} = 0.002$  m/s,  $L = L_0$ ,  $W = W_0$ ,  $h = 0$  W/(m<sup>2</sup> K))。

### 7.4.3 讨论

拉伸共振不稳定是薄膜流延过程中一个引人注目的现象<sup>[28, 44, 45]</sup>。尽管已经有大量的实验和数值模拟被报道<sup>[46]</sup>，但仍缺乏较为系统的稳定性分析。基于 PTT 模型，我们的仿真结果表明，早期报道的在拉伸增稠流体在发现的  $Drc$  上临界稳定区域没有被观测到，这可能与 UCM 流体模型不真实的应力演化有关<sup>[27]</sup>。由于实施了稳定化技术 (DEVSS 和 SUPG)，加工条件 ( $Dr, AR, v_{in}, h$ ) 和拉伸流变性质  $\eta_E$  对稳定性的影响得以在更大的参数空间进行分析。从而，一些新的现象被观测到：(i) 在( $Drc, AR$ )平面上发现了中性稳定曲线的两个峰值，这意味着存在不止一个合适的加工窗口。(ii) 增加  $\eta_E$  可以使流延过程更加稳定，无论是拉伸增稠还是变稀熔体皆是如此。在薄膜流延过程中，工艺参数和材料参数等  $v_{in}$ ,  $h$  和  $\lambda$  通过调节  $\eta_E$  从而影响薄膜流延的稳定性。关于这些有趣的发现，详细的讨论以及可能的解释如下。

如图 7.9 和 7.10 所示，材料参数会通过影响  $\eta_E$  进而影响  $Drc$ 。而  $\eta_E$  的值对三个材料参数比较敏感： $\alpha$ ,  $\xi$  和  $\lambda$  (图 7.2)。首先，在其他参数保持不变的情况下，在正常的薄膜流延应变率窗口中， $\alpha$  和  $\xi$  对  $Drc$  的影响相对较弱 (见图 7.9)。请注意， $Drc$  的最大值为 28，对应的  $\dot{\epsilon}$  范围为 0-5.7 s<sup>-1</sup> (图 7.2(c) 中红色虚线的左侧区域)。在此范围内，更改  $\alpha$  和  $\xi$  的值对  $\eta_E$  的演化影响并不大，这也导致  $Drc$  不会发生显著变化 (见图 7.9)。

$Drc$  随  $\lambda$  或  $v_{in}$  的增加而轻微的减小，如图 7.9 所示，这归因于较低的应变速率  $\dot{\epsilon}$  的范围。鉴于增加  $\lambda$  等价于增加  $\dot{\epsilon}$ ，因此需要进一步研究  $\lambda$  的影响，以验证稳定性对  $\eta_E$  的依赖性。图 7.10 显示， $\eta_E$  的增加增强了薄膜流延的稳定性，而  $\eta_E$  的减少则削弱了稳定性。注意到，即便是拉伸稀化流体，其  $\eta_E$  仍会随着  $\dot{\epsilon}$  的增加而略有抬升 (参见图 7.2(c) 中的蓝色曲线)，这会导致 I 区薄膜流延的稳

定性略有增强（参见图 7.10）。而对于拉伸增稠流体，随着  $\lambda$  的增加会引起  $\eta_E$  的快速升高，这显著增强了薄膜流延的稳定性（见图 7.10 (b) 中的区域 II）。显然，当  $\lambda$  超过图 7.10 (a) 和 (b) 中的临界值时（拉伸变稀熔体为 0.1 s，拉伸增稠熔体为 0.22 s），流延膜的稳定性总是随着  $\lambda$  的增加而略微减弱。合理的解释是， $\lambda$  的增加（即增强粘弹性）会导致曲线  $\eta_E - \dot{\epsilon}$  向左移动（请参见图 7.2 (d)），并且相应地， $\eta_E$  的最大值向低  $\dot{\epsilon}$  移动。如果  $\eta_E$  的最大值对应的  $\dot{\epsilon}$  仍大于  $\dot{\epsilon}$  的加工窗口，则增大  $\lambda$  等同于增大  $\dot{\epsilon}$  并因此增大  $\eta_E$ ，从而增强了薄膜流延的稳定性。另一方面，如果增加  $\lambda$  或等效的  $\dot{\epsilon}$  超过最大值，将导致薄膜流延的稳定性降低（参见图 7.10 中的区域 III）。

尽管  $\lambda$  和  $v_{in}$  对流动稳定性的影响被分别研究，而不是耦合到  $De$  中。但是  $\lambda$  和  $v_{in}$  对流动稳定性的影响是类似的（见图 7.6 (b) 和 9）。增加  $v_{in}$  会从整体上增加  $\dot{\epsilon}$ ，导致  $\eta_E - \dot{\epsilon}$  曲线向左移动，从而产生与增加  $\lambda$  等效的效果。不过，有趣的是，图 6.7 (b) 表明，对于拉伸增稠流体，流延薄膜的稳定性开始在大约  $v_{in} = 0.003$  m/s 时开始迅速增加。为了理解这一特殊现象，我们在临界拉伸比 ( $Dr_c$ ) 条件下计算了  $h=0$  W/(m<sup>2</sup> K) 时的拉伸应变率 ( $h$  被设置为零以排除薄膜的冷却影响)，如图 7.11 所示。最大和平均拉伸应变率分别为 8.6 和 2.0 s<sup>-1</sup>，它们位于  $\eta_E$  的指数增长区域，如图 7.11 (b) 所示。考虑到拉伸应变率的分布，将平均值 (2.0 s<sup>-1</sup>) 作为参考值，其对应于  $\eta_E$  的快速上升。显然， $v_{in}$  或者  $\dot{\epsilon}$  的进一步增加或将导致  $\eta_E$  的急剧增加，这是  $Dr_c$  或稳定性突然增加的原因（请参见图 7.6 (b)）。

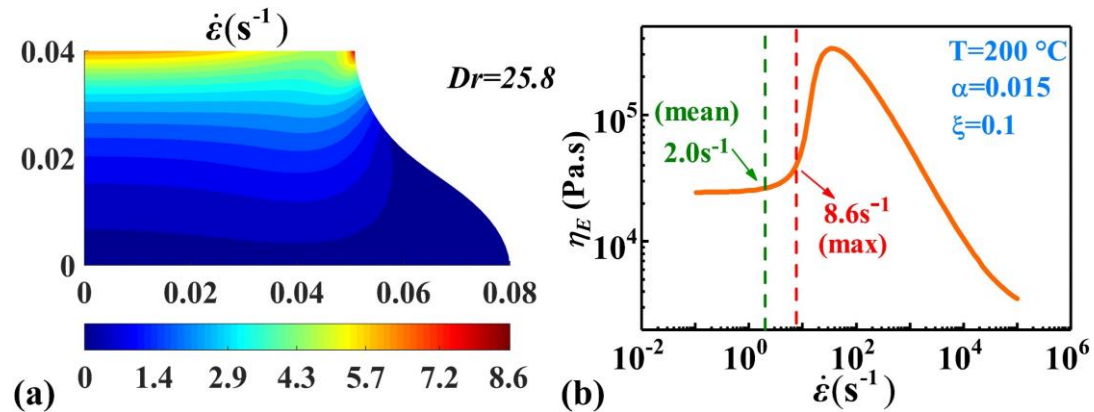


图 7.11 (a) 在临界拉伸比以及  $h = 0$  W/(m<sup>2</sup> K) 条件下的拉伸应变速率云图。(b) 在  $T = 200$  °C 时，拉伸增稠流体的  $\eta_E$  随  $\dot{\epsilon}$  的演化。

基于以上讨论， $h$  对稳定性的影响可以归因于  $\eta_E$ 。正如 Shin 等人所预测的那样<sup>[42]</sup>，拉伸共振的发生会随着  $h$  的增加而被抑制。图 7.2(e) 表明，增加  $h$  总是会提高  $\eta_E$ ，这无疑将提到拉伸变稀以及拉伸增稠流体的稳定性。此外，类似于图 7.6(b)，图 7.5(b) 也展示出在大约  $h = 50$  W/(m<sup>2</sup> K) 时拉伸增厚熔体薄膜流延的稳

定开始迅速增加，这也归因于  $\eta_E$  的迅速增加。

关于空气间隙  $AR$  对薄膜流延稳定性的影响，我们注意到 Kwon 等人<sup>[27]</sup>最近也报道了类似的现象。在此基础上，本文也介绍了三种变形类型。对比图 7.7 和图 7.8，无论是  $Rdt_N$  的增加还是  $Rdt_P$  的降低都提高了薄膜流延的稳定性。特别是在  $AR=0.4$  时， $Rdt_N=Rdt_P$  导致  $Drc$  达到一个最大值。然而，一旦 T 变形类型起主导作用( $0.4 \leq AR \leq 0.5$ )，薄膜流延的稳定性被减弱。在  $AR$  超过 0.5 之后， $Rdt_T$  逐渐下降，这导致了在  $AR = 0.7$  处观察到的另一个  $Drc$  最大值，与  $Rdt_T$  消失的情况相对应。这种现象的一种可能的解释是，当平面流动仍然主导变形 (P 型均匀流动) 时，过渡流或缩颈流 (T 型和 N 型流动，它们被视为非均匀流动) 的存在稳定了薄膜流延过程。然而，一旦 T 或 N 型非均匀流动占据主导地位，流动就会发生失稳。

## 7.5 小结

总的来说，本章采用单模态 PTT 模型研究了非等温条件下 2D 薄膜流延过程的流动稳定性和非线性动力学。由于采用了包括 DEVSS 和 SUPG 在内的稳定算法的实现，在比较宽的参数空间中系统地研究了加工条件和流变性质对流动不稳定性的影响，发现了一些有趣的现象。首先我们深入研究了拉伸粘度与流动不稳定性之间的关系，结果表明，增加拉伸粘度可以稳定拉伸增稠和稀化流体的流动。而冷却对于聚合物薄膜流延始终会产生稳定作用，这可以归因于拉伸粘度的变化。随着膜的纵横比  $AR$  的变化，观察到两个不同的  $Drc$  最大值，这可以归因于随  $AR$  变化的不同变形模式。应当指出，单模 PTT 本构方程仍不足以定量描述实际聚合物熔体的流变性质。一个更合适的选择是应用多模式本构方程，该方程的参数要与流变实验数据特别是伸长流变学数据相吻合。鉴于 PTT 模型无法提供有关分子结构的信息，因此我们的下一个工作将采用分子本构模型，例如 Pom-Pom 模型。此外，在我们的系统中观察到的一些特殊现象仍需要进一步的实验验证。

## 参考文献

- [1] Sollogoub C, Demay Y, Agassant JF. Cast film problem: A non isothermal investigation[J]. *International Polymer Processing*, 2003, 18: 80-86.
- [2] Sollogoub C, Demay Y, Agassant JF. Non-isothermal viscoelastic numerical model of the cast-film process[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2006, 138: 76-86.
- [3] Zavinska O, Claracq J, van Eijndhoven S. Non-isothermal film casting: Determination of draw resonance[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2008, 151: 21-29.
- [4] Smith S, Stolle D. Nonisothermal two-dimensional film casting of a viscous polymer[J]. *Polymer Engineering & Science*, 2000, 40: 1870-1877.
- [5] Barq P, Haudin JM, Agassant JF, Roth H, Bourgin P. Instability Phenomena in Film Casting Process[J]. *International Polymer Processing*, 1990, 5: 264-271.
- [6] Beaulne M, Mitsoulis E. Numerical Simulation of the Film Casting Process[J]. *International Polymer Processing*, 1999, 14: 261-275.
- [7] Silagy D, Demay Y, Agassant JF. Numerical simulation of the film casting process[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1999, 30: 1-18.
- [8] Ito H, Doi M, Isaki T, Takeo M. A model of neck-in phenomenon in film casting process[J]. *Journal of the Society of Rheology Japan*, 2003, 31: 157-163.
- [9] Smith S, Stolle D. Numerical simulation of film casting using an updated lagrangian finite element algorithm[J]. *Polymer Engineering & Science*, 2003, 43: 1105-1122.
- [10] Hagen T. On the membrane approximation in isothermal film casting[J]. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 2014, 65: 729-745.
- [11] Shiromoto S. The Mechanism of Neck-in Phenomenon in Film Casting Process[J]. *International Polymer Processing*, 2014, 29: 197-206.
- [12] Dobroth T, Erwin L. Causes of edge beads in cast films[J]. *Polymer Engineering & Science*, 1986, 26: 462-467.
- [13] Anturkar NR, Co A. Draw resonance in film casting of viscoelastic fluids: A linear stability analysis[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1988, 28: 287-307.
- [14] Canning K, Co A. Edge effects in film casting of molten polymers[J]. *Journal of Plastic Film & Sheeting*, 2000, 16: 188-203.
- [15] Pol HV, Thete SS, Doshi P, Lele AK. Necking in extrusion film casting: The role of macromolecular architecture[J]. *Journal of Rheology*, 2013, 57: 559-583.
- [16] Jung HW, Lee JS, Hyun JC. Sensitivity analysis of melt spinning process by frequency response[J]. *Korea-Australia Rheology Journal*, 2002, 14: 57-62.
- [17] Kim BM, Hyun JC, Oh JS, Lee SJ. Kinematic waves in the isothermal melt spinning of Newtonian fluids[J]. *Aiche Journal*, 1996, 42: 3164-3169.
- [18] Lee JS, Jung HW, Kim SH, Hyun JC. Effect of fluid viscoelasticity on the draw resonance dynamics of melt spinning[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2001, 99: 159-166.

- [19] van der Walt C, Hulsen MA, Bogaerds ACB, Meijer HEH, Bulters MJH. Stability of fiber spinning under filament pull-out conditions[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2012, 175: 25-37.
- [20] Fleissner M. Elongational Flow of HDPE Samples and Bubble Instability in Film Blowing[J]. *International Polymer Processing*, 1988, 2: 229-233.
- [21] Laffargue J, Parent L, Lafleur PG, Carreau PJ, Demay Y, Agassant JF. Investigation of Bubble Instabilities in Film Blowing Process[J]. *International Polymer Processing*, 2002, 17: 347-353.
- [22] Iyengar VR, Co A. Film casting of a modified Giesekus fluid: Stability analysis[J]. *Chemical Engineering Science*, 1996, 51: 1417-1430.
- [23] PisLopez ME, Co A. Multilayer film casting of modified Giesekus fluids .2. Linear stability analysis[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1996, 66: 95-114.
- [24] Shiromoto S, Masutani Y, Tsutsubuchi M, Togawa Y, Kajiwara T. The effect of viscoelasticity on the extrusion drawing in film-casting process[J]. *Rheologica Acta*, 2010, 49: 757-767.
- [25] Lee JS, Jung HW, Song H-S, Lee K-Y, Hyun JC. Kinematic waves and draw resonance in film casting process[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2001, 101: 43-54.
- [26] Lee JS, Jung HW, Hyun JC. Stabilization of film casting by an encapsulation extrusion method[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2004, 117: 109-115.
- [27] Kwon I, Jung HW, Hyun JC. Stability windows for draw resonance instability in two-dimensional Newtonian and viscoelastic film casting processes by transient frequency response method[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2017, 240: 34-43.
- [28] Kim JM, Lee JS, Shin DM, Jung HW, Hyun JC. Transient solutions of the dynamics of film casting process using a 2-D viscoelastic model[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2005, 132: 53-60.
- [29] McLeish TCB, Larson RG. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: The pom-pom polymer[J]. *Journal of Rheology*, 1998, 42: 81-110.
- [30] Verbeeten WMH, Peters GWM, Baaijens FPT. Differential constitutive equations for polymer melts: The extended Pom-Pom model[J]. *Journal of Rheology*, 2001, 45: 823-843.
- [31] Barborik T, Zatloukal M. Effect of viscoelastic stress state at die exit on extrusion film casting process: Theoretical study[J]. *AIP Conference Proceedings*, 2015, 1662: 030013.
- [32] d'Halewyu S, Agassant JF, Demay Y. Numerical simulation of the cast film process[J]. *Polymer Engineering & Science*, 1990, 30: 335-340.
- [33] Guénette R, Fortin M. A new mixed finite element method for computing viscoelastic flows[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1995, 60: 27-52.
- [34] Brooks AN, Hughes TJR. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1982, 32: 199-259.
- [35] Marchal JM, Crochet MJ. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1987, 26: 77-114.

- [36] P.T. Baaijens F. Mixed finite element methods for viscoelastic flow analysis: a review[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1998, 79: 361-385.
- [37] Manero O, Bautista F, Soltero JFA, Puig JE. Dynamics of worm-like micelles: the Cox–Merz rule[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2002, 106: 1-15.
- [38] Lee JS, Shin DM, Jung HW, Hyun JC. Transient solutions of the dynamics in low-speed fiber spinning process accompanied by flow-induced crystallization[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2005, 130: 110-116.
- [39] Walters K, Webster MF. The distinctive CFD challenges of computational rheology[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2003, 43: 577-596.
- [40] Béraudo C, Fortin A, Coupez T, Demay Y, Vergnes B, Agassant JF. A finite element method for computing the flow of multi-mode viscoelastic fluids: comparison with experiments[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1998, 75: 1-23.
- [41] Marchal J, Crochet M. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1987, 26: 77-114.
- [42] Shin DM, Lee JS, Kim JM, Jung HW, Hyun JC. Transient and steady-state solutions of 2D viscoelastic nonisothermal simulation model of film casting process via finite element method[J]. *Journal of Rheology*, 2007, 51: 393-407.
- [43] Silagy D, Demay Y, Agassant JF. Stationary and stability analysis of the film casting process[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1998, 79: 563-583.
- [44] Lee JS, Jung HW, Song HS, Lee KY, Hyun JC. Kinematic waves and draw resonance in film casting process[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2001, 101: 43-54.
- [45] Ahmed ZU, Khayat RE. Three Dimensional Film Stability and Draw Resonance[J]. *Journal of Fluids Engineering-Transactions of the Asme*, 2012, 134.
- [46] Demay Y, Agassant JF. An Overview of Molten Polymer Drawing Instabilities[J]. *International Polymer Processing*, 2014, 29: 128-139.

## 第八章 总结与展望

### 8.1 总结

断裂是材料失效的一种主要方式,而且断裂事件的发生有可能导致灾难性的后果。本研究基于目前最有前景的相场模型对断裂问题包括脆性断裂,软材料断裂进行了深入的讨论。一些新的算法和模型被提出以处理目前断裂领域特别是动态断裂的一些尚未解决的问题,比如裂纹的极限速度以及超高速的裂纹振荡等。除了固体断裂之外,本研究对粘弹性流体的动力学失稳-拉伸共振,也进行了一些初步的数值研究并发现了一些新的现象。

**本论文的具体研究成果可以概括为以下几点:**

(1) 提出了一种新的脆性断裂的混合自适应有限元相场法

针对脆性断裂的相场建模开发了一种名为 *ha*-PFM 的自适应有限元网格离散策略。*ha*-PFM 可以在每个求解步骤(时间步骤)依靠相场分布的进展来动态跟踪裂纹的扩展。通过指定上和下临界相场值作为开关,该方法无需其他额外准则即可自适应地细化(粗化)网格。此外,本研究还开发了自适应的多级混合三角形和四边形单元以离散计算域,其中四边形单元从具有最高和最低级别三角形单元转换而来,而三角形单元仅充当连接精细和粗糙单元的过渡单元。基于该方案,巧妙地消除了多尺度网格和 *h* 自适应网格中存在的悬架节点。与以前的自适应相场方法(APFM)相比,*ha*-PFM 大大降低了算法实现的复杂度,从而节省了大量的计算开销。在我们的测试中,*ha*-PFM 相比采用均匀网格离散的 PFM 最大可以提速 30 倍且不存在计算精度的损失。

(2) 揭示了动态脆性断裂的分岔判据和极限裂纹速度的来源

本研究基于工作(1)中提出的 *ha*-PFM 方法。通过变分相场模型的计算机模拟,揭示了脆性断裂的裂纹分岔准则,阐明了极限裂纹速度的来源。在没有任何先验假设的情况下,成功地再现实验中观察到的裂纹形态和速度演化。结果表明,在脆性断裂中,裂纹分岔遵循一个普适的能量准则。通过引入该能量判据,用连续介质理论可以较好地解决长期存在的极限裂纹扩展速度问题,说明裂纹的极限扩展速度来源于裂纹分叉。结合我们的相场模拟和经典的线弹性断裂理论,可以合理地解释脆性断裂中裂纹的路径选择。

(3) 耦合边缘基光滑有限元和相场方法来处理大变形断裂问题

这项工作首次在边缘基光滑有限元(ES-FEM)框架下构造了大变形断裂的相场模型。由于 ES-FEM 具有很高的精度和对网格变形的不敏感性,使得在大变形体系中,相场方法在处理复杂裂纹方面的优势得以充分释放。尽管这两种方法的组合相比现有的方案收敛性更好,精度更高,但是它的计算非常昂贵。因此,

本研究提出了一种用于 ES-FEM 和 PFM 耦合的多级自适应网格方案。与 FEM 背景下的自适应网格不同，自适应 ES-FEM 要求在每次更新网格后识别边缘及其支撑元素的连接性。尽管该策略占用了大约 2% 的额外计算开销，但它不仅提高了准确性，而且将计算效率提高了大约 20 倍。此外，本研究还通过几个代表性的数值示例验证了其有效性。尤其是，首次再现了类橡胶材料断裂实验中，裂纹遭遇弱界面而发生偏转。

#### (4) 建立一种无波速衰减的动态相场模型用于软材料的急速断裂失稳

本研究揭示了将脆性断裂的经典力学相场模型直接推广到超弹性材料的非线性动态断裂是不可行的。为此，基于非保守拉格朗日方程，推导出一种具有波速不变性的动态相场模型。针对大变形断裂中难以处理的网格变形问题，提出了一种原创的自适应变形网格去除方案 (ADMR)。考虑到快速断裂的数值处理涉及极高的时空分辨率、稳健的显式动力学和经过试验的多级混合自适应网格算法被采用。此外，本研究也通过两个准静态断裂基准验证了其可靠性。利用新模型和算法的优势，成功地复制了经典力学模型所不能模拟的超高速裂纹振荡和尖端分裂的不稳定性，与实验结果吻合较好。并简要地探讨了新相场模型与传统相场模型之间差异的来源。值得一提的是，这是整个力学学界首次通过数值模拟再现超高速裂纹振荡现象。

#### (5) 非等温粘弹性薄膜流延的非线性稳定性分析

这个工作采用微分粘弹性 PTT 模型来研究非等温薄膜流延的稳定性。一些稳定化算法如粘弹应力分裂 (DEVSS)，迎风伽辽金 (SUPG) 被首次耦合到非等温的膜模型中。数值模拟结果表明，拉伸流变行为对拉伸增稠和拉伸变稀熔体的流动稳定性起着主导作用，挤出速度、冷却等工艺参数和松弛时间等流变学参数对临界拉伸比的影响均可以归因于拉伸粘度。

#### (6) 自主开发两套高性能有限元求解器 *ha*-PFM 和 PolyLab

基于 MATLAB 2018 平台，我们开发了用于脆性/软材料准静态/动态断裂 (大变形) 的相场求解器：*ha*-PFM V1.0-3.0，采用并行计算，刚度矩阵稀疏存储。此外，还有粘弹性流体有限元求解器 PolyLab V1.0-2.0：定常和非定常粘弹性流体流动分析；采用多物理场耦合求解；具备扰动稳定性分析。

## 8.2 展望

基于本论文的研究工作，后续拟进行的研究将会涉及高形变材料断裂物理以及数值模型和算法两个方面，具体包括以下五个部分：

### (1) 为软材料急速断裂建模开发三维相场框架

相场模型的弥散裂纹属性赋予其在模拟断裂方面无可比拟的优势。然而，耦



合非线性动力学的三维相场框架仍然是缺乏的。基于二维软材料断裂建模的内部代码,将其扩展到三维是完全可行的。不过,这可能会遇到两个难题,即大形变断裂时的裂纹尖端的网格扭曲以及三维断裂问题的计算效率。在这方面,已经开发的自适应畸变网格去除策略 (ADMR) 可以作为一个可能的对策。此外,这项工作的进行对于阐明具有固有三维特性的裂纹的微分支不稳定性将具有重要意义。

#### (2) 裂纹振荡失稳的起源是什么?

高速移动的裂纹会表现出丰富的动力学行为。在第五章研究工作已经成功通过新开发的相场模型成功再现了实验中的裂纹振荡。然而,目前对这一裂纹动力学失稳现象的起源还没有一个令人满意的解释。通过第五章的工作,已经初步确定裂纹的动力学失稳对能量是敏感的。因此,这样研究计划的重点将是量化流入裂纹尖端的能量,这在实验上几乎是不可能的任务,但对于数值模拟却并不复杂。拟进行的研究计划(2)将有望给出裂纹振荡失稳的一般性准则和动力学起源。

#### (3) 裂纹的极限速度是什么?

除了裂纹的动力学失稳外,动态断裂的另一个长期存在的问题是裂纹的极限传播速度。连续介质理论预测裂纹的传播速度极限是瑞利波速  $V_R$ 。然而,实验中裂纹的速度几乎不会超过  $0.6V_R$ 。我们在第三章的工作已经解释了脆性材料的极限裂纹速度源于裂纹分岔的能量判据。但是,在一些超弹性材料中,甚至观测到超音速的断裂,那么裂纹的极限速度到底是什么?从能量和裂纹动力学的角度,本研究计划采用在第五章提出的新的大变形动态相场模型深入研究极限裂纹速度的起源,包括亚音速和超音速断裂。

#### (4) 软材料弱界面阻挠裂纹传播的机制

在第四章的数值算例部分展示了一个包含弱界面的类橡胶材料导致裂纹偏转的模拟,其结果与实验符合的很好。此外,基于作者已经进行的一些计算(没有在本论文中介绍)发现,裂纹的偏转与穿透与界面和整体材料强度的比值密切相关。该拟定的研究将继续深入探究弱界面导致裂纹偏转的机制。

#### (5) 粘弹性熔体断裂的相场建模

断裂相场模拟发源于固体力学学界,目前还没有关于粘弹性熔体断裂的相关报告。本论文在第一章介绍了聚合物加工中的熔体破裂失稳,一个有趣的想法是,将固体断裂的相场模型引入到粘弹性流体计算中。我们认为这是可行的,基于已经开发的粘弹性流体有限元求解器,断裂相场模型可以耦合到粘弹性流体的控制方程中。这项研究工作有望为熔体破裂的数值研究开辟一条新的道路。



## 致 谢

本论文的工作是在我的导师李良彬研究员的悉心指导下完成的。

首先，我要衷心感谢我的导师李良彬研究员。五年前我有幸来到了李老师的课题组。作为一名力学专业的学生，加入一个高分子物理方向的课题组，我最初十分迷茫，甚至想过退缩。李老师在了解了我的困惑之后，他跟我讲起了自己的求学经历，鼓励我要勇敢的探索，不要害怕失败。此外，他还抽出宝贵的时间带我出去交流学习。也许就是从那之后，我不再犹豫，也不再畏惧，下定决心专注于科研。在科研方面，李老师给了我很大的自由，让我专注于自己感兴趣的研究方向，给我提供了非常好的科研条件。李老师严谨的科研态度，渊博的学识以及敏锐的科研洞察力令我非常钦佩。在平时的生活方面，李老师为人正直又平易近人，他常常告诫我们要有担当，有些事情就需要我们去做，这不只是为自己，也是为我们的国家。李老师他不仅是我科研道路上的引路人，也是我做人的榜样，在此，谨向李老师致以衷心的感谢以及崇高的敬意！

另外，我要感谢丹麦科技大学 Ole Hassager 教授和黄倩教授、埃因霍温理工大学 Gerrit W.M. Peters 教授、山东大学赵国群老师和牟玥老师在我学习聚合物计算流变学时对我的指导。感谢长春应化所陈全老师和郑州大学王震老师(师兄)对流变数据测试提供的帮助。感谢上海交大沈泳星老师及其组内程诚和赖文玉在我学习脆性断裂相场模拟的提供的巨大帮助。感谢哥伦比亚大学 Waisman 教授、武杰博士，大连理工大学唐山老师及其组内张刚博士对我在有限形变断裂相场建模方面给予的重要指导。感谢中国科学技术大学倪勇老师，清华大学庄茁老师以及组内王涛博后对我在动态断裂相场模拟方面的宝贵建议。感谢加利福尼亚大学陈龙老师和湘潭大学魏华祎老师在自适应有限元数值计算方面给予的宝贵建议。还要感谢耶路撒冷希伯来大学 Jay Fineberg 教授和魏兹曼研究所 Eran Bouchbinder 教授在凝胶断裂物理方面给予的指导。

感谢我的本科朋友兼室友田秀全博士和初东阳博士带领我进入力学的断裂相场领域。感谢李斌博后，陈顺华博后和李天一师兄在断裂相场模拟方面给予的宝贵建议。

感谢刘艳萍师姐对我最初读研的支持和信任。感谢孟令蒲师兄和林元菲师姐在我刚加入课题组以及之后对我在科研上的引导。感谢那些在工作之余曾一起交流学术，打球以及健身的小伙伴（孟令蒲师兄、陈晓伟师兄、杨俊升师兄、常家瑞师兄、陈品章、唐孝良、张文文、褚朝阳、杨二杰、张瑞、鞠见竹）。感谢计算机模拟小组的兄弟姐妹们（杨俊升、唐孝良、许廷雨、解春、曾鋈、张孟楠、杨二杰、聂翠和彭帆）对我工作的支持，与你们一起讨论交流使我受益匪浅。

感谢国家同步辐射实验室为我提供的良好的学习环境和平台。感谢课题组的其他老师，包括陈亮老师、张文华老师、黄宁东老师、王道亮老师、陈威老师、周银贵老师、詹玉华老师、邱友凤老师以及班主任范乐老师对我学习以及生活上的关心和帮助。感谢课题组其他所有兄弟姐妹，包括已经毕业的刘栋、田楠、崔昆鹏、苏凤梅、纪又新、宋丽贤、周韦明、李薛宇、杨浩然、卢杰、吕飞、曹田、魏升慧、李静、Sarmad、吕艳坤、胡婷婷、张前磊、赵景云、孙蕾、李立夫、黄伟恒等以及目前正在读的：叶克、安敏芳、万彩霞、冯盛尧、Obaid、赵浩远、严琦、余瑞、陈鑫、Claud、besha、赵敬楠、吴同、夏智杰、李亚慧等，很高兴能够和你们一起在课题组学习，在此向你们对我的支持和帮助表示感谢。

这里，我还要特别感谢的是我的父母，妹妹还有从高中毕业一直陪伴我到博士毕业的妻子，感谢你们多年以来对我生活和学业上的支持和理解，是你们的支持和鼓励给了我前进的动力。

最后，感谢那些所有帮助过我的人！

**田富成**  
**2020年5月**  
**于中国科学技术大学**

## 在读期间发表的学术论文与取得的研究成果

研究成果:

1. **Fucheng Tian**, Xiaoliang Tang, Tingyu Xu, Junsheng Yang, Chun Xie, Liangbin Li\*. Nonlinear stability and dynamics of nonisothermal film casting, *Journal of Rheology*, 62, (1), 49-61, 1, 2018.
2. **Fucheng Tian**, Xiaoliang Tang, Tingyu Xu, Junsheng Yang, Liangbin Li\*. A hybrid adaptive finite element phase-field method for quasi-static and dynamic brittle fracture, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 120, (9), 1108-1125, 11, 2019.
3. **Fucheng Tian**, Xiaoliang Tang, Tingyu Xu, Liangbin Li\*. Bifurcation criterion and the origin of limit crack velocity in dynamic brittle fracture. *International Journal of Fracture (2020) 224:117–131*
4. **Fucheng Tian**, Xiaoliang Tang, Tingyu Xu, Liangbin Li\*. An adaptive edge-based smoothed finite element method (ES-FEM) for phase-field modeling of fractures at large deformations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering (under review)*, preprint arXiv:1909.10858, 2019.
5. **Fucheng Tian**, Jun Zeng, Xiaoliang Tang, Tingyu Xu, Liangbin Li\*. A dynamic phase field model with no attenuation of wave speed for rapid fracture instability in hyperelastic materials. *International Journal of Solids and Structures (Revision)*.
6. **Fucheng Tian**, et al. PolyLab 1.0: A parallel solver for analyzing draw resonance instability of viscoelastic fluids (**Preparing**).

7. 发明专利:

李良彬, **田富成**。一种用于断裂相场模拟的混合网格自适应方法。申请号:  
**201811101733.9**

8. 软著:

李良彬, **田富成**。聚物流延加工有限元求解器软件。登记号: **2018SR207748**  
李良彬, **田富成**。混合自适应断裂相场求解器软件 (申请中)。

合作研究成果:

1. Yuanfei Lin, **Fucheng Tian**, Lingpu Meng, Xiaowei Chen, Fei Lv, Qianlei Zhang, Liangbin Li\*. Microbuckling: A possible mechanism to trigger nonlinear instability of semicrystalline polymer, *Polymer*, 154, 48-54, 10, 2018.
2. Junsheng Yang, Xiaoliang Tang, **Fucheng Tian**, Tingyu Xu, Chun Xie, Gengxin Liu, Shijie Xie, Liangbin Li. Stretching and orientation dynamics of linear and comb

- polymers at shear stress overshoot, *Journal of Rheology*, 63, (6), 939-946, 11, 2019.
3. Xiaoliang Tang, Junsheng Yang, **Fucheng Tian**, Tingyu Xu, Chun Xie, Wei Chen, Liangbin Li\*. Flow-induced density fluctuation assisted nucleation in polyethylene, *The Journal of chemical physics*, 149, (22), 224901, 12, 2018.
4. Xiaoliang Tang, Junsheng Yang, Tingyu Xu, **Fucheng Tian**, Chun Xie, Liangbin Li\*. Local structure order assisted two-step crystal nucleation in polyethylene, *Physical Review Materials*, 1, (7), 073401, 12, 2017.
5. Jiarui Chang, Yuanfei Lin, Wei Chen, **Fucheng Tian**, Pinzhang Chen, Jingyun Zhao, Liangbin Li\*. Structural origin for the strain rate dependence of mechanical response of fluoroelastomer F2314, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 57, (10), 607-620, 05, 2019.
6. Jiarui Chang, Zhen Wang, Xiaoliang Tang, **Fucheng Tian**, Ke Ye, Liangbin Li\*. A portable extruder for in situ wide angle x-ray scattering study on multi-dimensional flow field induced crystallization of polymer, *Review of Scientific Instruments*, 89, (2), 025101, 02, 2018.
7. Chun Xie, Xiaoliang Tang, Junsheng Yang, Tingyu Xu, **Fucheng Tian**, Liangbin Li\*. Stretch-Induced Coil–Helix Transition in Isotactic Polypropylene: A Molecular Dynamics Simulation. *Macromolecules*, 51, (11), 3994-4002, 5, 2018.