第33卷第5期 计算力学学报 Vol. 33, No. 5
2016年10月 Chinese Journal of Computational Mechanics October 2016

DOI:10.7511/jslx201605020

连续胶体材料化学-力学耦合有限元理论及其在ABAQUS中UEL程序实现

魏 巍[1,2], 杨庆生*[1]

(1.北京工业大学 机械工程与应用电子技术学院,北京 100124;2.河北工程大学 土木工程学院,邯郸 056038)

摘 要:基于哈密顿原理,得到水凝胶的化学-力学耦合控制方程的等效积分形式和有限元形式。在整体坐标系下推导出用形函数表示的化学-力学耦合应变矩阵和单元刚度矩阵,并且得到在局部坐标系下的离散化形式。结合ABAQUS软件,编制了用户单元子程序UEL,通过数值算例验证了所开发单元的正确性,为在ABAQUS软件中实现各种耦合问题的有限元UEL编程提供了参考依据。

关键词:化学-力学耦合;耦合有限元法;高斯积分法;ABAQUS;用户自定义单元(UEL)

中图分类号:O431.2 **文献标志码**:A **文章编号**:1007-4708(2016)05-0785-06

1 引 言

水凝胶属于连续胶体材料的一种,具有吸水溶胀,失水收缩的物理特性。它们在外场(如热、电、磁、化和光等)作用下能够与外界发生能量和物质交换,产生较大力学响应,具有明显的化学-力学多场耦合特征。目前,水凝胶已经有效应用于人造器官、药物释放、生物和食品工程、制动器和传感器以及油田封装等领域[1]。

由于水凝胶化学-力学耦合问题的复杂性,解析模型只能解决相对简单的问题[2],数值模型具有更广泛的适应性。Wallmersperger等[3]针对聚电解质胶体,用有限元法研究了化学和力学刺激对胶体变形的影响。Li等[4]数值模拟了pH值敏感型凝胶周围溶液离子强度对扩散离子浓度和电势的分布以及变形的影响。Hong等[5]利用数值方法分析了胶体中膨胀导致的耦合变形问题。Marcombe等[6]发展了一个pH值敏感型水凝胶的约束膨胀理论,并分析了凝胶的非均匀膨胀情况。Yang等[7]通过考虑链缠结效应和交联点官能度的影响,数值分析了凝胶组合梁的化学-力学耦合行为。Zalachas等[8]应用非线性场理论和有限元法分析了pH值敏感型水凝胶环的非均匀变形和褶皱失稳问题。Chester等[9]运用UEL对弹性胶体进行了轴对称、平面应变和三维几何问题的数值模拟分析。在国内,张研等[10]提出了新的化学-力学损伤本构模型,描述水泥基材料在不同化学腐蚀下的应力应变关系。王鹏飞等[11]系统论述了自振荡凝胶的力-化耦合行为调控及其主要应用现状。唐洪祥等[12]通过在ABAQUS软件中编制三维弹性Cosserat连续体的UEL子程序,分析了微悬臂梁自由端的挠度和微杆扭转问题。杨庆生等[13]阐述了热-电-化-力学多场耦合基本理论,并通过数值算例分析了水凝胶和关节软骨的多场耦合作用。

本文首先通过哈密顿原理,得到化学-力学耦合控制方程的等效积分形式和相应的有限元列式。然后推导出化学-力学耦合刚度矩阵的数值积分形式。利用ABAQUS软件提供的用户单元接口,编制了化学-力学耦合问题的UEL子程序,并进行了算例验证。

2 化学-力学耦合基本理论和有限元公式

如果不考虑惯性力,并且认为只有一种离子控制化学扩散过程,则化学-力学耦合系统的控制方程为

$$\sigma_{ij,j}+f_i=0,\ \tau_0\xi_{i,i}+\dot{\mu}=0 \tag{1}$$

自然边界条件为

$$\sigma_{ij}n_j=\bar{t}_i,\ \xi_i n_i=\bar{\xi}_n \tag{2}$$

式中 σ_{ij} 为应力,f_i 为体积力,ξ_i 为离子的扩散通量,μ 为化学势,$\tau_0=R^*T_0/c_0$,R^* 为普适气体常数,T_0 为参考温度,c_0 为标准态离子浓度,$\bar{t}_i$ 为施加在边界上的面力,$\bar{\xi}_n$ 为施加在边界上的离子通量。

收稿日期:2015-08-07;**修改稿收到日期**:2015-12-18.
基金项目:国家自然科学基金(11172012,11472020)资助项目.
作者简介:杨庆生*(1962-),男,教授,博士生导师(E-mail:qsyang@bjut.edu.cn).

在化学驱动产生变形的过程中，离子扩散与力场相耦合，存在明显的化学-力学耦合作用。等温过程的化学-力学耦合本构方程[13]为

$$\sigma_{ij}=c_{ijkl}\varepsilon_{kl}-R^{*}T_{0}c\delta_{ij} \tag{3}$$

$$\mu=-R^{*}T_{0}\varepsilon_{m}+(R^{*}T_{0}/c_{0})c \tag{4}$$

式中 c_{ijkl} 为弹性常数，ε_{kl} 为应变，δ_{ij} 为 Kronecker 符号，ε_{m} 为系统单位体积的体积应变，c 为离子的浓度增量。

非定常化学-力学场的各类广义位移随着时间的变化，引起惯性力对平衡的影响，即在能量公式中，需要引入动能作用的影响。其中，系统的动能 K 所产生的功率

$$\dot{K}=\frac{1}{2}\int_{V}\dot{u}_{i}\ddot{u}_{i}\rho\mathrm{d}V \tag{5}$$

总的作用量

$$\Theta=\int_{t_1}^{t_2}\left[\int_{t_1}^{t_2}(\dot{K}-\dot{U})\mathrm{d}t\right]\mathrm{d}t \tag{6}$$

假设系统的总势能为 U，势能的功率为

$$\dot{U}=\int_{V}[\dot{\Psi}(\varepsilon_{ij},c)+P_{c}-f_{i}\dot{u}_{i}]\mathrm{d}V-\int_{\Gamma}(\bar{t}_{i}\dot{u}_{i}-\tau_{0}\bar{\xi}_{n}c)\mathrm{d}\Gamma \tag{7}$$

式中 V 为研究区域的体积，Γ 为研究区域的封闭面面积，Ψ 为系统的广义自由能，P_c 为离子的化学扩散能功率。其中

$$\delta\dot{\Psi}=\sigma_{ij}\delta\dot{\varepsilon}_{ij}+\dot{\mu}\delta c \tag{8}$$

$$P_{c}=-\frac{1}{2}\tau_{0}\xi_{i}c_{,i} \tag{9}$$

式中离子的扩散通量 $\xi_i=-\varphi_{ij}c_{,j}$，$\varphi_{ij}$ 为介质的离子化学扩散系数。不考虑凝胶的宏观运动和惯性力，利用哈密顿原理[14]

$$\begin{aligned}\delta\Theta=&\int_{t_1}^{t_2}\left[\int_{t_1}^{t_2}(\delta\dot{K}-\delta\dot{U})\mathrm{d}t\right]\mathrm{d}t=\\&\int_{t_1}^{t_2}\left\{\int_{t_1}^{t_2}\left[0-\left(\int_{V}(\delta\dot{\Psi}+\delta P_{c})\mathrm{d}V-\right.\right.\right.\\&\int_{V}f_{i}\delta\dot{u}_{i}\mathrm{d}V-\int_{\Gamma}\bar{t}_{i}\delta\dot{u}_{i}\mathrm{d}\Gamma+\\&\left.\left.\left.\int_{\Gamma}\tau_{0}\bar{\xi}_{n}\delta c\mathrm{d}\Gamma\right)\right]\mathrm{d}t\right\}\mathrm{d}t=0\end{aligned} \tag{10}$$

把式(3,4,8,9)代入式(10)，经过推导得

$$\begin{aligned}\delta\Theta=&\int_{t_1}^{t_2}\left\{\int_{t_1}^{t_2}\left[\int_{V}(-C_{ijkl}\varepsilon_{kl}\delta\dot{\varepsilon}_{ij}+R^{*}T_{0}c\delta\dot{\varepsilon}_{m}+\right.\right.\\&R^{*}T_{0}\dot{\varepsilon}_{m}\delta c-\tau_{0}\dot{c}\delta c+\tau_{0}\xi_{i}\delta c_{,i})\mathrm{d}V+\\&\int_{V}f_{i}\delta\dot{u}_{i}\mathrm{d}V+\int_{\Gamma}\bar{t}_{i}\delta\dot{u}_{i}\mathrm{d}\Gamma-\\&\left.\left.\int_{\Gamma}\tau_{0}\bar{\xi}_{n}\delta c\mathrm{d}\Gamma\right]\mathrm{d}t\right\}\mathrm{d}t=\\&\int_{t_1}^{t_2}\{\delta\Theta_{1}+\delta\Theta_{2}\}\mathrm{d}t=0\end{aligned} \tag{11}$$

由式(11)可以得到

$$\int_{V}(\delta\dot{\varepsilon}_{ij}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}-\delta\dot{\varepsilon}_{m}R^{*}T_{0}c-\delta\dot{u}_{i}f_{i})\mathrm{d}V-\int_{\Gamma}\delta\dot{u}_{i}\bar{t}_{i}\mathrm{d}\Gamma=0 \tag{12}$$

$$\int_{V}(c_{0}\delta c\dot{\varepsilon}_{m}-\delta c\dot{c}-\delta c_{,i}\varphi_{ij}c_{,j})\mathrm{d}V-\int_{\Gamma}\delta c\bar{\xi}_{n}\mathrm{d}\Gamma=0 \tag{13}$$

在化学-力学场中，基本的变量是位移 $\boldsymbol{u}$ 和浓度 c。分别对位移和浓度进行插值，得到

$$\boldsymbol{u}=\mathbf{N}_{u}\boldsymbol{u}^{e},\ c=\mathbf{N}_{c}\boldsymbol{c}^{e} \tag{14}$$

式中 $\mathbf{N}_u$ 和 $\mathbf{N}_c$ 分别为单元位移形函数和浓度形函数，$\boldsymbol{u}^e$ 和 $\boldsymbol{c}^e$ 分别为单元节点位移向量和节点浓度向量。如果采用平面 8 节点单元。则

$$\boldsymbol{u}^{e}=(u_{1}v_{1},\cdots,u_{8}v_{8})^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{c}^{e}=(c_{1},\cdots,c_{8})^{\mathrm{T}} \tag{15}$$

$$\mathbf{N}_{u}=\begin{bmatrix}\mathrm{N}_{1}&0&\cdots&\mathrm{N}_{8}&0\\0&\mathrm{N}_{1}&\cdots&0&\mathrm{N}_{8}\end{bmatrix} \tag{16}$$

$$\mathbf{N}_{c}=\begin{bmatrix}\mathrm{N}_{1}&\mathrm{N}_{2}&\cdots&\mathrm{N}_{7}&\mathrm{N}_{8}\end{bmatrix} \tag{17}$$

将式(14～17)代入式(12,13)，并考虑 $\delta\dot{\boldsymbol{u}}^{e\mathrm{T}}$ 和 $\delta\boldsymbol{c}^{e\mathrm{T}}$ 的任意性，可以得到

$$\begin{aligned}&\sum_{e=1}^{E}\int_{V}\mathbf{B}_{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{B}_{u}\mathrm{d}V\boldsymbol{u}^{e}-R^{*}T_{0}\sum_{e=1}^{E}\int_{V}\mathbf{B}_{m}^{\mathrm{T}}\mathbf{N}_{c}\mathrm{d}V\boldsymbol{c}^{e}=\\&\sum_{e=1}^{E}\int_{V}\mathbf{N}_{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{f}\mathrm{d}V+\sum_{e=1}^{E}\int_{\Gamma}\mathbf{N}_{u}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{t}}\mathrm{d}\Gamma\end{aligned} \tag{18}$$

$$\begin{aligned}&c_{0}\sum_{e=1}^{E}\int_{V}\mathbf{N}_{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}_{m}\mathrm{d}V\dot{\boldsymbol{u}}^{e}-\sum_{e=1}^{E}\int_{V}\mathbf{N}_{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{N}_{c}\mathrm{d}V\dot{\boldsymbol{c}}^{e}-\\&\sum_{e=1}^{E}\int_{V}\mathbf{B}_{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varphi}\mathbf{B}_{c}\mathrm{d}V\boldsymbol{c}^{e}=\sum_{e=1}^{E}\int_{\Gamma}\mathbf{N}_{c}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{\xi}}_{n}\mathrm{d}\Gamma\end{aligned} \tag{19}$$

式中 $\mathbf{C}$ 为弹性常数矩阵，$\mathbf{B}_u$，$\mathbf{B}_m$ 和 $\mathbf{B}_c$ 分别为力学应变矩阵，平均应变的应变矩阵和浓度梯度的应变矩阵，$\boldsymbol{f}$ 为单位体积体力向量，$\bar{\boldsymbol{t}}$ 是施加在边界上的面力向量，$\boldsymbol{\varphi}$ 为离子化学扩散系数向量。由此可得化学-力学耦合有限元方程为

$$\mathbf{K}_{s}\boldsymbol{u}^{e}-R^{*}T_{0}\mathbf{M}\boldsymbol{c}^{e}=\mathbf{F}_{s} \tag{20}$$

$$c_{0}\mathbf{M}^{\mathrm{T}}\dot{\boldsymbol{u}}^{e}-\mathbf{X}\dot{\boldsymbol{c}}^{e}-\mathbf{K}_{c}\boldsymbol{c}^{e}=\mathbf{F}_{c} \tag{21}$$

在时间域上采用线性差分进行离散，在时间段 $\Delta t=t_{n+1}-t_n$ 内，利用线性插值公式

$$\dot{\boldsymbol{u}}^{e}=\frac{\partial\boldsymbol{u}^{e}}{\partial\boldsymbol{t}}=\frac{\boldsymbol{u}_{n+1}^{e}-\boldsymbol{u}_{n}^{e}}{\Delta\boldsymbol{t}} \tag{22}$$

$$\dot{\boldsymbol{c}}^{e}=\frac{\partial\boldsymbol{c}^{e}}{\partial\boldsymbol{t}}=\frac{\boldsymbol{c}_{n+1}^{e}-\boldsymbol{c}_{n}^{e}}{\Delta\boldsymbol{t}} \tag{23}$$

在区间 $[t_n,t_{n+1}]$ 利用 $\boldsymbol{u}^e=\theta\boldsymbol{u}_{n+1}^e+(1-\theta)\boldsymbol{u}_n^e$，$\boldsymbol{c}^e=\theta\boldsymbol{c}_{n+1}^e+(1-\theta)\boldsymbol{c}_n^e$。其中 θ 为插值参数。当 $\theta=1$ 时，即为完全隐式法，结果处理比较平滑，不会出现震荡现象[15]。由式(20,21)，在每个时间步内，载荷全

量加载。经过推导可得有限元方程的矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{uc} \\ \mathbf{K}_{cu} & \mathbf{K}_{cc} \end{bmatrix}_t \begin{Bmatrix} \Delta \boldsymbol{u} \\ \Delta c \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -\mathbf{K}_s \boldsymbol{u}_n^e + R^* T_0 M \boldsymbol{c}_n^e + \mathbf{F}_s \\ \Delta t \mathbf{K}_c \boldsymbol{c}_n^e + \Delta t \mathbf{F}_c \end{Bmatrix}_t \tag{24}$$

刚度矩阵公式分别为

$$\mathbf{K}_{uu} = \sum_{e=1}^{E} \int_V \mathbf{B}_u^{\mathrm{T}} \mathbf{C} \mathbf{B}_u \mathrm{d}V \tag{25}$$

$$\mathbf{K}_{uc} = -R^* T_0 \sum_{e=1}^{E} \int_V \mathbf{B}_m^{\mathrm{T}} \mathbf{N}_c \mathrm{d}V \tag{26}$$

$$\mathbf{K}_{cu} = c_0 \sum_{e=1}^{E} \int_V \mathbf{N}_c^{\mathrm{T}} \mathbf{B}_m \mathrm{d}V \tag{27}$$

$$\mathbf{K}_{cc} = -\sum_{e=1}^{E} \int_V \mathbf{N}_c^{\mathrm{T}} \mathbf{N}_c \mathrm{d}V - \Delta t \sum_{e=1}^{E} \int_V \mathbf{B}_c^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\varphi} \mathbf{B}_c \mathrm{d}V \tag{28}$$

离散方程中刚度矩阵是耦合的，反映了化学与力学系统的相互作用。根据以上公式形式，便可以进行有限元计算。

3　化学-力学耦合有限元公式的数值实现

要实现化学-力学耦合的有限元方程式的计算，需要把化学-力学耦合刚度矩阵中各个变量数值离散化。采用平面 8 节点单元，单元应变表达式为

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}_u \boldsymbol{u}^e \tag{29}$$

$$\mathbf{B}_u = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial x} & 0 & \cdots & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial y} & \cdots & 0 & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial y} \\ \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial y} & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial y} & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial x} \end{bmatrix} \tag{30}$$

式中 $\mathbf{B}_u$ 为应变矩阵。浓度的梯度为

$$\nabla c = \mathbf{B}_c \boldsymbol{c}^e \tag{31}$$

$$\mathbf{B}_c = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial x} & \frac{\partial \mathrm{N}_2}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial \mathrm{N}_7}{\partial x} & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial x} \\ \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial y} & \frac{\partial \mathrm{N}_2}{\partial y} & \cdots & \frac{\partial \mathrm{N}_7}{\partial y} & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial y} \end{bmatrix} \tag{32}$$

式中 $\mathbf{B}_c$ 为浓度梯度的应变矩阵。平面状态下的平均应变为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_m = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \mathbf{B}_m \boldsymbol{u}^e \tag{33}$$

$$\mathbf{B}_m = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial x} & \frac{\partial \mathrm{N}_1}{\partial y} & \cdots & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial x} & \frac{\partial \mathrm{N}_8}{\partial y} \end{bmatrix} \tag{34}$$

式中 $\mathbf{B}_m$ 为平均应变的应变矩阵。在整体坐标系 x, y 下，分别把形函数矩阵和应变矩阵代入式(25～28)，得到平面应力状态下的四个刚度矩阵中的被积函数分别为

$$\mathbf{B}_u^{\mathrm{T}} \mathbf{C} \mathbf{B}_u = \frac{\mathrm{E}}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial x}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial x} + \frac{1-\nu}{2}\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial y}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial y} & \nu\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial x}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial y} + \frac{1-\nu}{2}\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial y}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial x} \\ \nu\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial y}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial x} + \frac{1-\nu}{2}\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial x}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial y} & \frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial y}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial y} + \frac{1-\nu}{2}\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial x}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial x} \end{bmatrix} \tag{35}$$

$$\mathbf{B}_m^{\mathrm{T}} \mathbf{N}_c = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial x}\mathrm{N}_j \\ \frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial y}\mathrm{N}_j \end{Bmatrix} \tag{36}$$

$$\mathbf{N}_c^{\mathrm{T}} \mathbf{B}_m = \begin{bmatrix} \mathrm{N}_i \frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial x} & \mathrm{N}_i \frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial y} \end{bmatrix} \tag{37}$$

$$\mathbf{N}_c^{\mathrm{T}} \mathbf{N}_c = \mathrm{N}_i \mathrm{N}_j \tag{38}$$

$$\mathbf{B}_c^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\varphi} \mathbf{B}_c = \varphi \left[\frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial x}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial x} + \frac{\partial \mathrm{N}_i}{\partial y}\frac{\partial \mathrm{N}_j}{\partial y} \right] \tag{39}$$

式中 $i = 1, 2, \cdots, 8$；$j = 1, 2, \cdots, 8$。E 为弹性模量，ν 为泊松比。

利用有限元法中的平面 8 节点等参变换、雅克比矩阵和高斯积分法，计算刚度阵的体积积分可以变换为[−1,1]上的多重定积分，进而可以采用数值积分对公式进行有限元离散。每个单元采用 3×3 高斯点的形式，单元刚度矩阵可以离散为

$$\mathbf{K}_{uu}^e = \sum_{i=1}^{9} \mathbf{B}_u^{\mathrm{T}}(\xi_i, \eta_i) \mathbf{C} \mathbf{B}_u(\xi_i, \eta_i) \left| \mathbf{J}(\xi_i, \eta_i) \right| t_0 H_i \tag{40}$$

$$\mathbf{K}_{uc}^e = -R^* T_0 \sum_{i=1}^{9} \mathbf{B}_m^{\mathrm{T}}(\xi_i, \eta_i) \mathbf{N}_c(\xi_i, \eta_i) \left| \mathbf{J}(\xi_i, \eta_i) \right| t_0 H_i \tag{41}$$

$$\mathbf{K}_{cu}^e = c_0 \sum_{i=1}^{9} \mathbf{N}_c^{\mathrm{T}}(\xi_i, \eta_i) \mathbf{B}_m(\xi_i, \eta_i) \left| \mathbf{J}(\xi_i, \eta_i) \right| t_0 H_i \tag{42}$$

$$\mathbf{K}_{cc}^e = -\sum_{i=1}^{9} \mathbf{N}_c^{\mathrm{T}}(\xi_i, \eta_i) \mathbf{N}_c(\xi_i, \eta_i) \left| \mathbf{J}(\xi_i, \eta_i) \right| t_0 H_i - \Delta t \sum_{i=1}^{9} \mathbf{B}_c^{\mathrm{T}}(\xi_i, \eta_i) \mathbf{B}_c(\xi_i, \eta_i) \left| \mathbf{J}(\xi_i, \eta_i) \right| t_0 H_i \tag{43}$$

式中 H_i 为高斯权重，$\mathbf{J}$ 为单元的雅克比矩阵，ξ_i 和 η_i 为局部坐标系中的高斯点坐标，t_0 为单元的厚度。把式(35～39)代入式(40～43)，式(40～43)可表示为局部坐标系 (ξ, η) 和单元节点整体坐标 (x_i, y_i) 的函数形式。随后，便可使用 Fortran 等计算机语言来实现公式的程序化。

4　化学-力学 UEL 单元的编制和数值算例及验证

ABAQUS 软件平台为用户提供了自定义单

元二次开发的程序接口-用户单元子程序 UEL(user defined element)。化学-力学耦合单元的调用过程为,在加载步开始时,ABAQUS 主程序调用 UEL 子程序,初始化变量值,ABAQUS 传递给 UEL 的位移增量为 0,计算单元内部节点力为 0。然后,将变量的初始值和存储的状态变量(SDV)值传递给 UEL 的相应变量。最后根据外荷载的大小和刚度矩阵 AMATRX(24,24) 计算节点位移。SVARS(*)用来保存求解过程中的状态变量,本程序用以保存单元节点处的自由度矢量。RHS(MLVARX,*)用来保存单元内部节点力,并与外荷载叠加计算残余力值,以此判断程序的收敛性。如果收敛,则可能在下一个增量步增加步长求解;如果不收敛,则返回 ABAQUS 主程序进行第 $i+1$ 次迭代,主程序将根据 UEL 子程序第 i 次迭代所得到的单元刚度矩阵与残余力项计算位移增量修正量与总位移量,直至收敛。在 UEL 结束时,变量的更新值将通过接口返回主程序,输出位移和浓度值。

算例 如图 1 所示,20×50 mm^2 的水凝胶板 $ABCD$,BC 边固定,AB 边与溶液接触。水凝胶材料参数列入表 1。水凝胶中的初始浓度为 $c_0=250$ mol/L,同时在左侧边加 $c_L=500$ mol/L 的浓度,右侧边加 $q=1\times10^6$ N/mm 的均布力作用。应用所编制 ABAQUS 用户单元子程序进行计算。

针对图 1 开发的二维化学-力学 UEL 耦合单元的节点数为 8,节点自由度为 3,分别为水平自由度 u 和竖向自由度 v 以及浓度自由度 c。材料参数分别为弹性模量 E,泊松比 ν 和扩散率 D。对于刚度矩阵采用 3×3 高斯数值积分。在 ABAQUS 输入文件(.inp)中相应的关键字为

```
*USER ELEMENT,NODES=8,TYPE=U1,PROP=3,
COORDINATES=2,VARIABLE=3
1, 2, 11
(定义用户单元属性及材料参数,8 节点,只定义 1 种自定义单元 U1,3 个参数,2 维坐标,变量为 3 个,位移自由度为 1,2;浓度自由度为 11)
*ELEMENT,TYPE=U1,ELSET=UEL
(定义单元类型为 U1,单元名称为 UEL)
1, 1, 2, 28, 27, 287, 288, 289, 290
…
250, 259, 260, 286, 285, 770, 820, 821, 818
(单元号,第 1 个节点号,第 2 个节点号,…,第 8 个节点号)
*UEL PROPERTY,ELSET=UEL
(输入单元名称为 UEL 的材料内部参数)
1.08e6, 0.1, 4.9e10
(弹性模量,泊松比,化学扩散系数)
```

当生成一个 input 文件后,便可以通过以下的命令进行与 ABAQUS 子程序有关的分析。

```
abaqus job =xxx(inp 文件名)
user=xxx(子程序文件名)
```

从图 2 可以看出,当同时施加力和浓度边界条件时,水凝胶板产生耦合变形,其形状与文献[3]的结果相吻合,但是本文的计算理论和方法与之完全不同,可见 UEL 子程序的可靠性,从而验证了本文开发的平面 8 节点化学-力学耦合单元的的正确性。因此,可以使用本文的化学-力学耦合单元来分析水凝胶在不同边界条件下的物理问题。

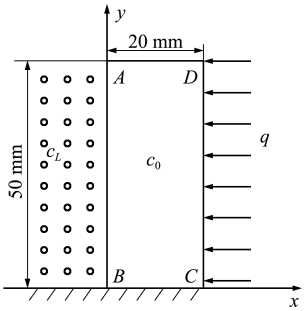

图 1 模型示意图

Fig. 1 Schematic of the model

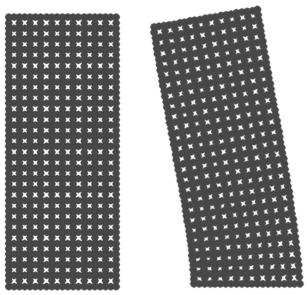

图 2 平衡时刻凝胶板的变形

Fig. 2 Deformation graph of hydrogel sheet under balance time

表 1 水凝胶板材料参数[16]

Tab. 1 Material parameters of the hydrogel sheet

弹性模量 E/MPa	泊松比 ν	扩散率 D/(m^2·s^{-1})	初始浓度 c_0/(mol·L^{-1})	大气常数 R^*/[J·(mol·K)$^{-1}$]	绝对温度 T_0/K
1.08	0.1	4.9e-10	250	8.314	298

5 结　论

为了在 ABAQUS 软件平台下开发化学-力学耦合等参单元，基于化学-力学耦合有限元公式，详细地介绍了编制化学-力学耦合问题的用户单元子程序 UEL 的理论推导和程序实现过程。

通过哈密顿原理，引入系统的广义自由能和化学扩散能功率，得到化学-力学耦合控制方程的等效积分形式和相应的有限元列式。利用有限元中的平面 8 节点等参变换，在整体坐标系下推导出用形函数表示的化学-力学耦合应变矩阵和单元刚度矩阵。利用雅克比矩阵和高斯积分法，推导出化学-力学耦合刚度计算矩阵的数值离散化表达式。使用 Fortran 语言编制程序来实现公式的运算。通过对比计算结果与文献结果，对开发单元的正确性进行了验证。同时，也为在 ABAQUS 软件中实现各种耦合问题的有限元 UEL 编程实现提供了参考依据。

参考文献(References)：

[1] Ahmed E M. Hydrogel: preparation, characterization, and applications: a review [J]. *Journal of Advanced Research*, 2015, **6**(2): 105-121.

[2] Yang Q S, Tian H, Qin Q H. Analytical solutions for a one-dimensional chemo-mechanical coupling problem [J]. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 2014, **27**(2): 137-145.

[3] Wallmersperger T, Kröplin B, Gülch R W. Coupled chemo-electro-mechanical formulation for ionic polymer gels-numerical and experimental investigations [J]. *Mechanics of Materials*, 2004, **36**(5-6): 411-420.

[4] Li H, Yew Y K. Simulation of soft smart hydrogels responsive to pH stimulus: ionic strength effect and case studies [J]. *Materials Science and Engineering*, 2009, **29**(7): 2261-2269.

[5] Hong W, Liu Z S, Suo Z G. Inhomogeneous swelling of a gel in equilibrium with a solvent and mechanical load [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2009, **46**(17): 3282-3289.

[6] Marcombe R, Cai S Q, Hong W, et al. A theory of constrained swelling of a pH-sensitive hydrogel [J]. *Soft Matter*, 2010, **6**(4): 784-793.

[7] Yang Q S, Ma L H, Shang J J. The chemo-mechanical coupling behavior of hydrogels incorporating entanglements of polymer chains[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2013, **50**(14): 2437-2448.

[8] Zalachas N, Cai S Q, Suo Z G, et al. Crease in a ring of a pH-sensitive hydrogel swelling under constraint [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2013, **50**(6): 920-927.

[9] Chester S A, Di Leo C V, Anand L. A finite element implementation of a coupled diffusion-deformation theory for elastomeric gels [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2015, **52**: 1-18.

[10] 张　研，宋智通. 水泥基材料的化学-力学耦合作用[J]. 计算力学学报，2009，**26**(5)：697-702. (ZHANG Yan, SONG Zhi-tong. Chemo-mechanical coupling of cement-based material [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2009, **26**(5): 697-702. (in Chinese))

[11] 王鹏飞，赵兴红，林　敏，等. 自振荡凝胶的力-化耦合行为调控及其应用研究[J]. 力学进展，2014，**44**(1)：418-446. (WANG Peng-fei, ZHAO Xing-hong, LIN Min, et al. Regulation of the chemomechanical behaviors of self-oscillating gels and the related application [J]. *Advances in Mechanics*, 2014, **44**(1): 418-446. (in Chinese))

[12] 唐洪祥，胡兆龙. 三维 Cosserat 连续体模型与微结构尺寸相关效应的有限元分析[J]. 计算力学学报，2013，**30**(3)：399-405. (TANG Hong-xiang, HU Zhao-long. Three dimensional cosserat continumm model and finite element analysis for the size effect of micrao-structure [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2013, **30**(3): 399-405. (in Chinese))

[13] 杨庆生，魏巍，马连华. 智能软材料热-电-化-力学耦合问题的研究进展[J]. 力学进展，2014，**44**(1)：137-187. (YANG Qing-sheng, WEI Wei, MA Lian-hua. Research advances in thermo-electro-chemo-mechanical coupling problem for intelligent soft materials[J]. *Advances in Mechanics*, 2014, **44**(1): 137-187. (in Chinese))

[14] 钱伟长. 变分法及有限元[M]. 北京：科学出版社，1980. (QIAN Wei-chang. *Variational Method and Finite Element Method*[M]. Beijing: Science Press, 1980. (in Chinese))

[15] 王　崧，周坚鑫，王　来，等. 有限元方法编程[M]. 北京：电子工业出版社，2003. (WANG Song, ZHOU Jian-xin, WANG Lai, et al. *Programming the Finite Element Method* [M]. Beijing: Electronic Industry Press, 2003. (in Chinese))

[16] Loret B, Simões F M F. A framework for deformation, generalized diffusion, mass transfer and growth in multi-species multi-phase biological tissues [J]. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 2005, **24**(5): 757-781.

Finite element theory of chemo-mechanical coupling and the program implementation of UEL in ABAQUS for the continuous colloidal material

WEI Wei[1,2], YANG Qing-sheng*[1]

(1. School of Engineering Mechanics, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China;
2. School of Civil Engineering, Hebei University of Engineering, Handan 056038, China)

Abstract: Based on Hamilton's principle, the equivalent integral forms of chemo-mechanical coupling governing equations and corresponding finite element forms are obtained. The strain matrix and element stiffness matrix represented by shape functions in chemo-mechanical coupling are derived in the global coordinate system. Discrete forms of element stiffness matrix are acquired in the local coordinate system. The user element subroutine UEL is programmed in ABAQUS finite element package. The numerical example shows the validity of the UEL developed, which can provide some references for the programming realization of UEL in ABAQUS software for various coupling problems with the form of the finite element.

Key words: chemo-mechanical coupling; coupled finite element method; gauss integral method; ABAQUS; user element subroutine(UEL)

(上接第 759 页)

Particle flow simulation for effects of rock block shape on mechanical behavior of soil-rock mixture

JIN Lei, ZENG Ya-wu*

(School of Civil Engineering, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

Abstract: In order to explore the meso-mechanisms of effects of rock block shape on mechanical behavior of soil-rock mixture (SRM), spherical, cubic and cuboid-shaped rock blocks are taken into consideration. SRM with cubic rock blocks are compared with that of spherical rock blocks to explore the effects of block angularity. SRM with cuboid-shaped rock blocks are compared with that of cubic rock blocks to explore the effects of block sphericity. Firstly, a 3D DEM refined modeling method for specific rock block shape was developed. Then, particle flow numerical models of SRM with 30% and 80% rock block proportion (RBP) were established, whose block shape is spherical, cubic and cuboid-shaped respectively. Then, particle flow simulation for large scale triaxial tests of SRM was conducted to obtain strength and deformation characteristics of SRM with different rock block shape and RBP. Finally, meso-mechanisms of effects of rock block shape on mechanical behavior of SRM were intensively analyzed. The results show that rock block shape affect the mechanical behavior of SRM and the degree of influence are closely related to RBP. The evolution of coordination number, mean rotation of rock blocks and frictional work can well reflect the meso-mechanisms of effects of rock block shape.

Key words: soil-rock mixture; particle flow code; rock block shape; rock block proportion; meso-mechanisms