

DOI: 10.7511/jslx20210413002

基于 COMSOL 的脆性材料相场断裂模型

张文兵^{*1,2}, 沈振中², 徐力群², 张宏伟², 甘磊², 李舸航³

(1. 上海海事大学 海洋科学与工程学院, 上海 201306;

2. 河海大学 水利水电学院, 南京 210098; 3. 上海市堤防泵闸建设运行中心, 上海 200080)

摘要:相场法通过一系列微分方程描述材料断裂过程,避免了繁琐的裂纹面追踪,在模拟裂纹的萌生、扩展和分叉等方面具有优势。介绍了基于相场法的脆性材料断裂模型,给出了脆性材料断裂问题相场法控制方程的推导过程,提出了基于分步迭代法在 COMSOL 中实现脆性材料相场断裂模型的方法。再现了脆性材料单元模型和单边缺口平板受拉及受剪作用下的开裂过程,模拟的裂纹扩展路径与已有文献的结果相近,验证了程序的合理性。针对脆性材料相场断裂模型包含的诸多参数,采用 Morris 法对影响荷载-位移关系的脆性材料断裂模型参数进行了全局敏感性分析,结果表明,杨氏模量(E)、临界能量释放率(G_c)和位移增量(Δu_c)是影响模型荷载-位移关系输出结果的主要参数。基于 COMSOL 实现的相场断裂模型能够有效模拟脆性材料的裂纹萌生和扩展断裂过程,模型参数 E , G_c 和 Δu_c 对材料断裂性能的提升或模型参数反演效率的提高具有重要影响。

关键词:脆性材料;相场法;COMSOL;数值模拟;敏感性分析

中图分类号: TU45; O346.1

文献标志码: A

文章编号: 1007-4708(2023)02-0273-08

1 引言

裂纹扩展的数值模拟方法是计算力学中长期存在的问题。对于连续介质断裂模型,其最大的难点是处理裂纹处位移场的不连续性^[1]。在有限元框架下,模拟裂纹扩展的连续方法可以分为分离型和弥散型两类^[2]。分离型裂纹扩展模拟方法是以不连续位移场描述裂纹,如单元删除法^[3,4]和界面单元法^[5,6]等,这几种方法简单,但是存在一定的局限性,如裂纹只能在网格上或者网格边界上扩展,这就导致模型的计算结果对网格的依赖性强,并且容易造成数值的不稳定性^[7-9]。虽然扩展有限元法弥补了上述方法的不足^[10,11],但其在模拟三维空间裂缝扩展以及裂纹分叉或多裂隙贯通过程仍存在一定的困难^[2,12]。弥散型裂纹扩展模拟方法则是将尖锐裂纹通过在完好和完全损坏的材料状态间平滑过渡进而弥散化。传统的弥散型裂纹模型不能显式地追踪裂纹的扩展路径,仅能通过后处理才能得到^[13]。

近年来,有学者提出了一种称为相场模型

(Phase-field model)^[14,15]的新型弥散型裂纹模拟方法。该方法的核心思想是利用弥散的相边界近似描述实际尖锐的裂纹,通过引入一个介于 0 和 1 之间的标量场(即相场)来描述材料的断裂或损伤程度,并通过相场控制方程控制相场变量的演化,这样,裂纹的扩展就可以转化为一个多场耦合问题,使得在模拟过程中不需要不断地显式追踪裂纹面,避免了裂纹不连续的相关问题。相场法基于裂纹的变分原理框架而建立,该原理可以看作是 Griffith 断裂力学理论的延伸,不仅可以预测裂纹的萌生,而且可以预测裂纹的扩展路径。此外,在利用相场法模拟裂纹扩展时,不需要预先指定裂纹的形状和尺寸就可以很好地描述任意维度裂纹的形成与扩展过程,同时也克服了 Griffith 理论需要复杂的裂纹发展判定法则的不足,目前已受到国内外学者的广泛关注^[2,13,16]。

相场法已成为研究断裂问题的重要方法之一。然而,通过复杂的编程来实现利用相场法计算裂纹的扩展问题费时费力,并使得计算机编程能力较弱的学者望而却步。若能将其嵌入至商业有限元软件中,或能提供其在商业有限元软件中的实现方法,将能极大促进相场法的进一步应用。COMSOL 作为一款专注于多场耦合的商业有限元分析软件,已广泛应用于多个领域。由于其提供的多种便捷二次开发方式^[17],以及在模型的材料属性、边

收稿日期: 2021-04-13; 修改稿收到日期: 2021-08-03.

基金项目: 国家自然科学基金(52179130; 42177129); 上海市“科技创新行动计划”启明星项目(扬帆专项)(23YF1416100)资助项目.

作者简介: 张文兵*(1993-),男,博士,讲师
(E-mail: zhangwb@shmtu.edu.cn).

界条件以及源汇项设定方面极具灵活性^[18],使得利用其实现相场裂缝扩展模型具有很大优势。

本文介绍了脆性材料相场断裂模型,基于断裂变分准则和弹性应变能分解原理,推导了相场断裂模型的控制方程,给出了脆性材料相场断裂模型在COMSOL的实现方法和求解过程,并利用脆性材料单元模型和单边缺口平板拉伸及剪切算例对数值模型进行了验证。此外,考虑脆性材料相场断裂模型包含诸多参数,在模型应用时存在较大的校正工作量,为此采用Morris法对影响荷载-位移关系输出的相场断裂模型参数进行了全局敏感性分析。

2 脆性材料相场断裂模型

2.1 尖锐裂纹弥散化表征

考虑一空间域为 $d=1, 2, 3$ 的开裂脆性材料,其具有不连续的外部边界和内部尖锐裂纹面(图1(a))。在相场模型中,通过引入一标量 $\phi(x)$ ($\phi(x) \in [0, 1]$, 即相场变量)作为裂纹的过渡区,并利用此过渡区来近似代表不连续的尖锐裂纹面, $\phi=0$ 表示材料处于完好状态, $\phi=1$ 表示裂纹产生(图1(b))。对于一维问题, $\phi(x)$ 可以表示为

$$\phi(x) = e^{-|x|/l_0} \quad (1)$$

式中 l_0 为长度尺度参数,用于控制弥散型裂纹过渡区的宽度。

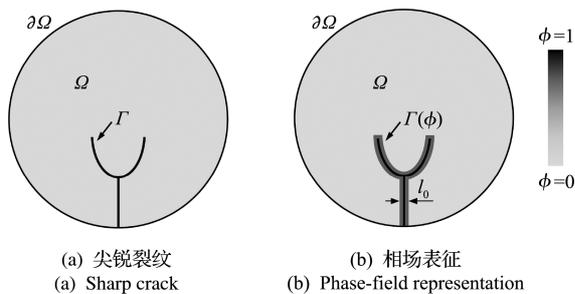


图1 尖锐裂纹弥散化表征
Fig. 1 Diffusion representation of sharp crack

相场变量 $\phi(x)$ 在空间域内定义了一个连续的标准场来表征裂纹的拓扑,则可利用 $\phi(x)$ 表示单位体积内裂纹表面密度,即

$$\gamma(\phi, \nabla\phi) = \frac{\phi^2}{2l_0} + \frac{l_0}{2} |\nabla\phi|^2 \quad (2)$$

材料域内裂纹表面密度函数则可以表示为

$$\Gamma(\phi) = \int_{\Omega} \gamma(\phi, \nabla\phi) d\Omega \quad (3)$$

2.2 断裂变分准则

断裂变分准则认为^[19],物体内部单位面积产生断裂所需的能量等于临界断裂能量密度 G_c ,即临

界能量释放率。物体的总势能 Π 可用弹性势能 $\Psi_e(\boldsymbol{\varepsilon})$ 、断裂能 Ψ_f 和外力所做功 W_{ext} 表示为

$$\Pi(u, \Gamma) = \underbrace{\int_{\Omega \setminus \Gamma} \Psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})) d\Omega}_{\Psi_e(\boldsymbol{\varepsilon})} + \underbrace{\int_{\Gamma} G_c d\Gamma}_{\Psi_f} - \underbrace{\int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{u} d\Omega - \int_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} dS}_{W_{\text{ext}}} \quad (4)$$

式中 \mathbf{u} 为位移场, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u})$ 为应变张量, $\Psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}))$ 为弹性应变能密度, G_c 为临界能量释放率, \mathbf{b} 为体积力, \mathbf{f} 为作用在物体上的面力。

此外,断裂变分准则还认为,在 $t \in [0, T]$ 时刻,任意位置 \mathbf{x} 处的裂纹面 $\Gamma(\mathbf{x}, t)$ 的起裂、扩展和分叉等任何行为都应使总势能最小,并且满足不可逆条件,即裂缝一旦形成将不能恢复,可表示为

$$-\frac{\delta\Pi(\mathbf{u}, \Gamma)}{\delta\Gamma} = 0, \Gamma(\mathbf{x}, s) \leq \Gamma(\mathbf{x}, t), (s < t) \quad (5)$$

根据相场变量定义的裂缝表面密度,可将边界积分表达的裂缝表面能近似转化为域积分,即

$$\int_{\Gamma} G_c d\Gamma \approx \int_{\Omega} G_c \gamma d\Omega = \int_{\Omega} G_c \left(\frac{\phi^2}{2l_0} + \frac{l_0}{2} |\nabla\phi|^2 \right) d\Omega \quad (6)$$

2.3 弹性应变能分解

对于脆性断裂,通常认为裂缝的张开是由拉力所致,而压应力会导致裂缝闭合。因而, Miehe 等^[14] 对应变张量进行了正负分解为

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^+ + \boldsymbol{\varepsilon}^-, \boldsymbol{\varepsilon}^{\pm} = \sum_{i=1}^d \langle \varepsilon_i \rangle^{\pm} \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \quad (7, 8)$$

式中 $\boldsymbol{\varepsilon}^+$ 为拉应变张量, $\boldsymbol{\varepsilon}^-$ 为压应变张量, ε_i 和 \mathbf{n}_i 分别为主应变值和主应变的方向, d 为空间维度,麦考利括号定义为 $\langle x \rangle^{\pm} = (x \pm |x|)/2$ 。

弹性应变能密度可以分解为

$$\Psi_e^{\pm}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{\lambda}{2} \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle^{\pm 2} + \mu \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^{\pm 2}) \quad (9)$$

式中 $\Psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon})$ 和 $\Psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon})$ 分别为受拉和压应变能密度, $\text{tr}(\cdot)$ 为求迹, λ 和 μ 为拉梅参数, $\lambda = E\nu/(1+\nu)(1-2\nu)$, $\mu = E/2(1+\nu)$, 其中, E 和 ν 分别为杨氏模量和泊松比。

假设相场变量只对弹性能密度的拉伸部分产生影响,则弹性应变能密度可以表示为^[20]

$$\Psi_e(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi) = [g(\phi) + \kappa] \Psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}) + \Psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (10)$$

式中 $g(\phi)$ 为退化函数, $g(\phi)$ 应满足 $g(0) = 1$, $g(1) = 1$ 和 $g'(1) = 0$, 可表示为 $g(\phi) = (1 - \kappa)(1 - \phi)^2$, κ 为模型参数, $0 < \kappa \ll 1$, 用于避免当 $\phi = 1$ 时产生数值奇异。

2.4 相场断裂模型控制方程

根据式(6)近似表达的裂缝表面能和式(10)表

达的弹性应变能密度,物体的总势能可改写为

$$\begin{aligned} \Pi(\mathbf{u}, \phi) = & \int_{\Omega} \left\{ [(1-\kappa)(1-\phi)^2 + \kappa] \Psi_e^+(\boldsymbol{\varepsilon}) + \right. \\ & \left. \Psi_e^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \right\} d\Omega + \int_{\Omega} G_c \left(\frac{\phi^2}{2l_0} + \frac{l_0}{2} |\nabla \phi|^2 \right) d\Omega - \\ & \int_{\Omega} b_i u_i d\Omega - \int_{\partial\Omega} f_i u_i dS \end{aligned} \quad (11)$$

根据变分最小化原理,总势能对 (\mathbf{u}, ϕ) 求变分,可以推导出相场断裂模型的控制方程为

$$\begin{cases} \text{Div}[\boldsymbol{\sigma}] + b_i = 0 \\ \left[\frac{2l_0(1-\kappa)\Psi_e^+}{G_c} + 1 \right] \phi - l_0^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} = \frac{2l_0(1-\kappa)\Psi_e^+}{G_c} \end{cases} \quad (12)$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为柯西应力张量,可以通过弹性应变能 Ψ_e^\pm 对应变 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 求偏导得出

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = [(1-\kappa)(1-\phi)^2 + \kappa] [\lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle^+ \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}^+] + \lambda \langle \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \rangle^- \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}^- \quad (13)$$

式中 \mathbf{I} 为二阶单位张量。

为满足裂纹演化的不可逆条件, Miehe 等^[21] 引入了历史状态变量来防止在加载或卸载过程中裂纹发生愈合,

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, t) = \max_{s \in [0, t]} \Psi_e^+[\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, s)] \quad (14)$$

式中 $\mathcal{H}(\mathbf{x}, t)$ 为从开始加载到当前 t 时刻在 \mathbf{x} 处具有的最大受拉弹性应变能。

将式(12)的受拉应变能密度 Ψ_e^+ 替换成 $\mathcal{H}(\mathbf{x}, t)$, 则相场断裂模型可以改写为

$$\begin{cases} \text{Div}[\boldsymbol{\sigma}] + b_i = 0 \\ \left[\frac{2l_0(1-\kappa)\mathcal{H}}{G_c} + 1 \right] \phi - l_0^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} = \frac{2l_0(1-\kappa)\mathcal{H}}{G_c} \end{cases} \quad (15)$$

由于 $\mathcal{H}(\mathbf{x}, t)$ 为单调递增函数,因此保证了裂纹演化的不可逆条件。

3 相场断裂模型的实现方法

3.1 有限元法离散

3.1.1 位移场问题

当物体受体力 \mathbf{b} 和面力 \mathbf{f} 作用时,其位移场的弱解形式可以表示为

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} dS \quad (16)$$

式中 $\delta \mathbf{u}$ 为虚位移函数。

为避免显示求解法对加载步长的苛刻要求,采用基于增量法的应变投影算子求解方法^[22]。第 $n+1$ 步长时的应变张量可表示为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^\pm = \tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^\pm : \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1} \quad (17)$$

式中 $\tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^\pm$ 为第 $n+1$ 步长时的应变投影算子,可

以通过第 n 步长时的应变投影算子结果近似表示为^[22]

$$\tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^+ \simeq \mathbf{P}_n^+ + \beta(\phi_n) \Delta t_n \frac{\partial \mathbf{P}_n^+}{\partial t}, \quad \tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^- \simeq \mathbf{J} - \tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^+ \quad (18)$$

式中 \mathbf{P}_n^\pm 可通过文献[21]给出, Δt_n 为步长, $\beta(\phi_n)$ 为权函数,用于避免当 $\phi_n = 0$ 和 $\phi_n = 1$ 时产生的数值奇异,权函数可取为 $(1-\kappa)(1-\phi)^2$; \mathbf{J} 为四阶单位张量。

弹性矩阵 \mathbf{D} 可表示为

$$\mathbf{D} = \frac{\boldsymbol{\sigma}_{n+1}}{\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}} = [(1-\kappa)(1-\phi)^2 + \kappa] [\lambda H(\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)) \mathbf{Z} + 2\mu \tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^+] + [\lambda H(-\text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)) \mathbf{Z} + 2\mu \tilde{\mathbf{P}}_{n+1}^-] \quad (19)$$

式中 $H(\mathbf{x})$ 为 Heaviside 函数,当 $x > 0$ 时, $H(\mathbf{x}) = 1$, 当 $x \leq 0$ 时, $H(\mathbf{x}) = 0$; $\mathbf{Z} = \mathbf{I}^T \otimes \mathbf{I}$ 。

根据有限元近似表达式 $\mathbf{u} = \mathbf{N}_u u_i$, $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) = \mathbf{B}_u u_i$ 可以得到位移场的有限元离散格式为

$$\mathbf{K}_u(\mathbf{u}_n) \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1} \quad (20)$$

$$\mathbf{K}_u(\mathbf{u}_n) = \int_{\Omega} \left\{ \mathbf{B}_u^T \mathbf{D} \mathbf{B}_u \right\} d\Omega$$

$$\mathbf{F}_{n+1} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b}_{n+1} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{f}_{n+1} dS \quad (21)$$

式中 u_i 为结点 i 上的位移, \mathbf{N}_u 和 \mathbf{B}_u 分别为形函数矩阵和应变转换矩阵。

3.1.2 相场问题

根据式(15)的相场控制方程,等式两边同乘试函数 $\delta \phi$, 并在计算域 Ω 上进行积分,可以得到相场的有限元弱解形式为

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left\{ \left[2\mathcal{H}_n(1-\kappa) + \frac{G_c}{l_0} \right] \phi_{n+1} \delta \phi + G_c l_0 \nabla \phi_{n+1} \cdot \right. \\ \left. \nabla(\delta \phi) \right\} d\Omega = \int_{\Omega} 2(1-\kappa)\mathcal{H}_n \delta \phi d\Omega \end{aligned} \quad (22)$$

式中 ϕ_{n+1} 为第 $n+1$ 步时的相场变量, \mathcal{H}_n 为上一个荷载步的计算结果,可表示为

$$\mathcal{H}_{n+1} = \begin{cases} \Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) & (\Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) > \mathcal{H}_n) \\ \mathcal{H}_n & (\Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) \leq \mathcal{H}_n) \end{cases} \quad (23)$$

相场变量和相场变量梯度场可表示为

$$\phi = \mathbf{N}_\phi \phi_i, \quad \nabla \phi = \mathbf{B}_\phi \phi_i \quad (24)$$

式中 ϕ_i 为结点 i 上的相场变量, \mathbf{N}_ϕ 和 \mathbf{B}_ϕ 分别为相场变量的形函数矩阵及形函数对应的导数矩阵。

综上,相场的有限元离散格式可表示为

$$\mathbf{K}_\phi \boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}_\phi \quad (25)$$

式中 $\boldsymbol{\phi}$ 为包含所有结点相场的矩阵, \mathbf{K}_ϕ 和 \mathbf{F}_ϕ 分别为相场变量的刚度矩阵和整体结点荷载矩阵,

$$\mathbf{K}_\phi = \int_{\Omega} \left\{ \mathbf{N}_\phi^T \left[2\mathcal{H}_n(1-\kappa) + \frac{G_c}{l_0} \right] \mathbf{N}_\phi + \mathbf{B}_\phi^T G_c l_0 \mathbf{B}_\phi \right\} d\Omega$$

$$\mathbf{F}_\phi = \int_{\Omega} 2(1-\kappa) \mathbf{N}_\phi^T \mathcal{H}_n d\Omega \quad (26)$$

3.2 COMSOL 中的模块设定

对于位移场的求解,选择软件内置固体力学模块下的线弹性材料模型进行研究。由于弹性矩阵 \mathbf{D} 是与时间步有关的变量,而该模块中默认的设置并不能实现这样的过程。因此,在利用此方式求解位移场时,还需进行修改和定义。具体为选定固体力学模块下的线弹性材料,将固体模型修改为各向异性,材料数据顺序设置为标准(XX,YY,ZZ,XY,YZ,XZ),并将弹性矩阵 \mathbf{D} 设定为用户定义模式。弹性矩阵 \mathbf{D} 可以参考文献[23]给定的矩阵,以局部变量形式定义在模型中。

对于相场变量的求解,COMSOL 中并未预先嵌入相关模块,但其为用户提供了不同层次的二次开发接口^[17],用户可根据自身需求灵活地选择。本研究选择软件提供的自定义偏微分方程组(PDEs)模块用于求解相场变量 ϕ , 内置的 PDEs 具体如下,

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + \alpha u = f \quad (27)$$

式中 u 为因变量, $e_a, d_a, c, \alpha, \gamma, \beta, a$ 和 f 为用户自定义系数。

为利用系数型 PDE 表征相场控制方程,将相场控制方程按照式(27)进行整理,并定义各系数(即 $e_a = d_a = \alpha = \beta = \gamma = 0, u = \phi, c = l_0^2, a = 1 + 2l_0(1-\kappa)\mathcal{H}/G_c, f = 2l_0(1-\kappa)\mathcal{H}/G_c$), 完成对相场控制方程的等效。此外,选择内置的域常微分方程(ODE)和微分代数方程(DAE)模块接口对历史状态变量 \mathcal{H} 进行定义,其数学表达式为

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} = f \quad (28)$$

各系数定义为 $e_a = d_a = 0, u = \mathcal{H}, f$ 定义为

$$f = \begin{cases} \mathcal{H}_{n+1} - \Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) & (\Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) > \mathcal{H}_n) \\ \mathcal{H}_{n+1} - \mathcal{H}_n & (\Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon}) \leq \mathcal{H}_n) \end{cases} \quad (29)$$

式(29)可以以条件语句的形式定义在软件中。

对于受拉应变能密度 $\Psi_{n+1}^+(\boldsymbol{\varepsilon})$, 需将其以局部变量的形式定义在组件选项下,以便此处调用。

3.3 分步求解过程

为避免模型计算结果收敛性差的问题,采用分步求解算法对位移场和相场进行解耦计算,并通过变量交换实现耦合作用。对于静态裂纹的扩展,其分步求解过程可参见文献[23]。在利用模型计算时,选择基于隐式 Newton-Raphson 方法的瞬态求解器,并采用广义- α 法作为时间步进方式进行计

算,以便获得较好的稳定性。此外,为保证材料在开始断裂时计算的稳定性和加速性,采用 Anderson 加速度加速收敛,并将迭代空间维度选择在 50 以上,以控制计算过程中迭代增量的数量。

4 数值验证

4.1 单元模型验证

为验证模型开发的有效性,引入四结点四边形等参元模型(以下简称单元模型)进行验证。单元模型边长 $L = 1 \text{ mm}$, 底部边界为固定边界,左右边界仅固定 x 方向的位移,上部边界在固定 x 方向位移的同时,在 y 方向施加位移荷载,如图 2 所示。

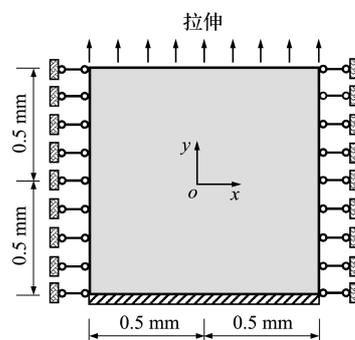


图2 单元模型及边界条件

Fig. 2 One element model and boundary conditions

计算参数采用文献[24]的材料参数为,杨氏模量 $E = 210 \text{ GPa}$,泊松比 $\nu = 0.3$,临界能量释放率 $G_c = 5 \times 10^3 \text{ N/m}$,长度尺度参数 $l_0 = 0.1 \text{ mm}$,模型参数 $\kappa = 1 \times 10^{-9}$ 。上边界 y 方向的加载步为 1000,每个步长的位移增加量 Δu_y 为 10^{-4} mm 。

图 3 给出了不同算法下单元模型受拉时的轴向应力及相场变量与应变的关系。可以看出,本文计算所得的应力-应变及相场变量-应变关系与解析解和文献[24]结果基本一致。相较而言,本文结果更接近解析解,表明所构建的相场断裂模型能

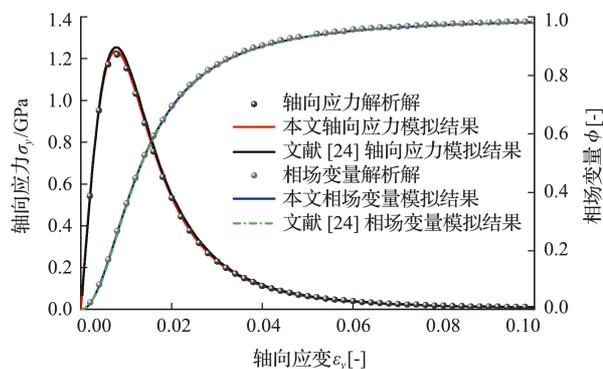


图3 单轴拉伸情况下单元模型轴向应变与轴向应力和相场变量的关系

Fig. 3 Relationship between axial strain, axial stress and phase-field variable for one element model subjected to uniaxial tension

够较好地反映物体单元的本构关系。另外,单元模型中的相场变量随着轴向应变的增大而增大,表明数值算法满足裂纹演化不可逆条件的要求。因此,本文基于构建的相场断裂模型能够有效模拟脆性材料单元的裂缝萌生和扩展断裂过程。

4.2 单边缺口平板拉伸及剪切算例验证

单元模型虽能简化对相场断裂模型的理解,但计算结果不涉及单元网格尺寸等因素的影响。为进一步验证模型的准确性,对经典的单边缺口平板拉伸和剪切试验模型进行模拟计算。图4给出了受拉伸和受剪切的单边缺口平板几何模型及边界条件。对于拉伸模型,其边界条件参考4.1节中单元模型的设置。需要注意的是,在起裂前500个时间步,每一个步长的位移增量设置为 1×10^{-5} mm,起裂后为 1×10^{-6} mm。对于剪切模型,其底部边界同样为固定边界,左右边界只固定y方向的位移,上部边界在固定y方向位移的同时,在x方向施加位移荷载。在起裂前80个时间步,每一个步长对应的位移增量为 1×10^{-4} mm,起裂后为 1×10^{-5} mm。模型网格均采用四节点四边形的映射网格,网格尺寸h取为 3.9×10^{-3} mm,共生成64262个单元。表1给出了拉伸和剪切时相场断裂模拟的模型参数。

表1 相场断裂模型计算参数

Tab.1 Parameters for phase-field fracture model

参数	E/GPa	ν	$G_c/N \cdot m^{-1}$	l_0/mm	κ
取值	210	0.3	2700	1.5×10^{-2}	1×10^{-9}

图5给出了拉伸和剪切作用下的单边缺口平板上边界荷载-位移关系曲线。可以看出,本文计算所得荷载-位移关系曲线与文献[25]的结果基本一致。由于算法的不同,两者结果在局部位置存在一定偏差,但总体趋势吻合度高。

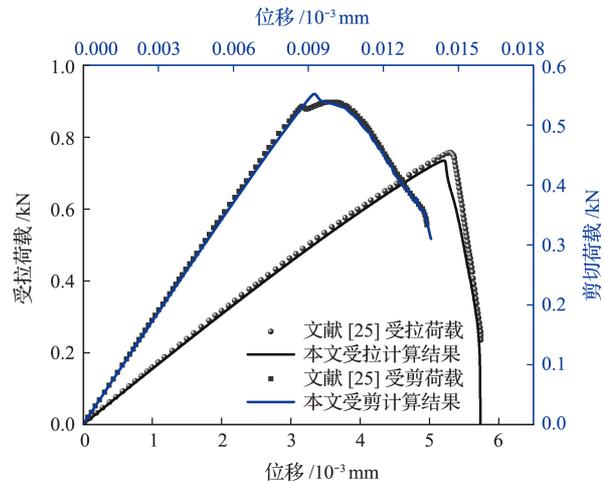


图5 拉伸和剪切作用下荷载-位移曲线及文献结果对比
Fig.5 Load-displacement curves subjected to tensile and shear and its comparison with a reference result

图6给出了单边缺口平板上边界受拉和受剪时的裂纹扩展路径,基本与实际相符,并与文献[14,16,25]的规律一致。对于脆性断裂问题,裂纹扩展速度和裂尖应力场通常也是学者关注的重点。根据裂纹扩展速度的定义及图6显示的单边缺口平板裂纹扩展过程可知,拉伸和剪切模型中的裂纹扩展速度分别约为 4.73×10^{-4} mm/s和 8.52×10^{-4} mm/s。图7给出了单边缺口平板在受拉和

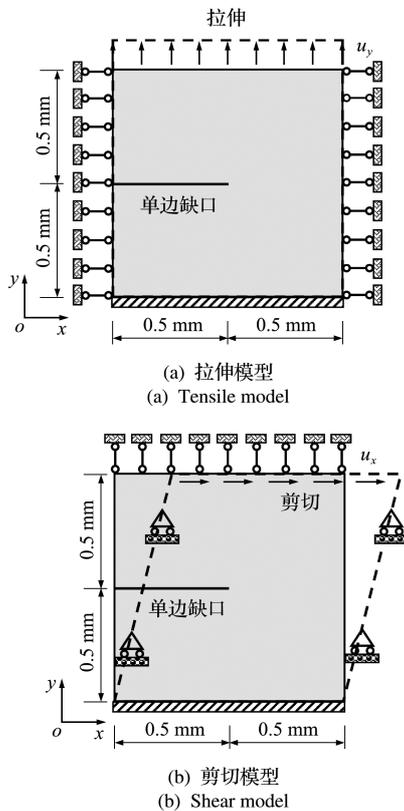


图4 受拉和受剪单边缺口平板的几何模型及边界条件
Fig.4 Geometry and boundary conditions for the notched plate subjected to tensile and shear

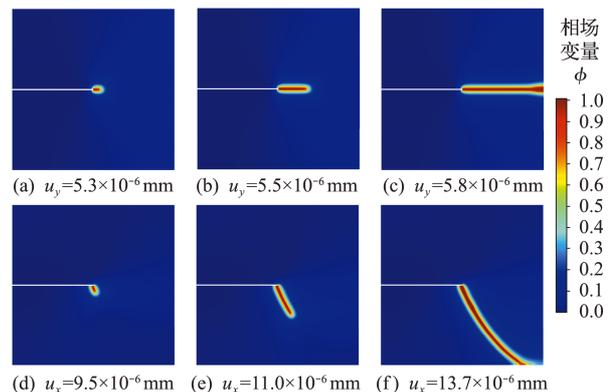


图6 受拉和受剪时的裂纹扩展路径
Fig.6 Crack propagation path in tensile and shear

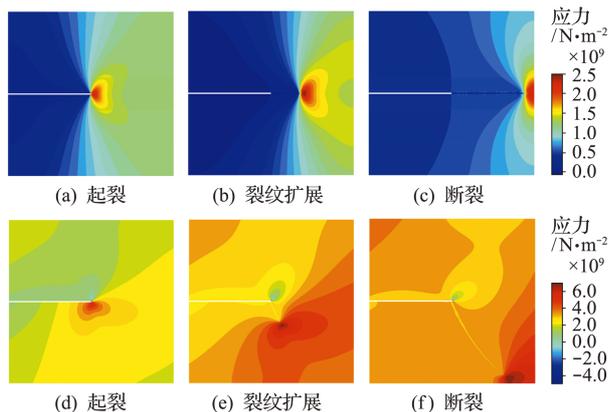


图7 受拉和受剪时的第一主应力分布

Fig. 7 Distribution of the first principal stress in tensile and shear

受剪作用下的第一主应力分布情况。可以看出,应力最大值位于裂纹尖端,在拉伸和剪切模型中,裂尖应力的最大值可分别达到 $2.72 \times 10^9 \text{ N/m}^2$ 和 $6.26 \times 10^9 \text{ N/m}^2$,随着裂纹的扩展,裂纹尖端不断前移,应力集中区域的位置也随之向前推进。由此可见,基于相场法模拟的单边缺口平板应力分布符

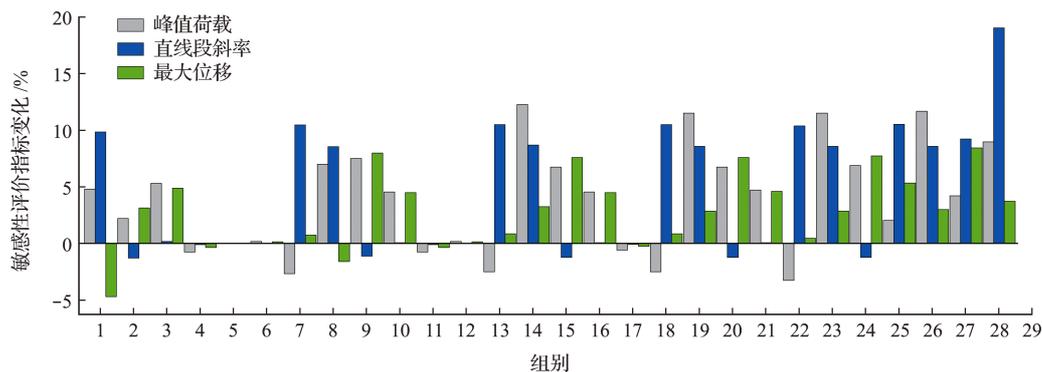


图8 各评价指标变化

Fig. 8 Variations of evaluation indexes

可以看出,当只有单个参数发生变化时(组别1~7),由峰值荷载和最大位移对参数 E 和 G_c 较为敏感,其次依次为 Δu_x , ν , l_0 , h 和 κ 。荷载-位移曲线的直线段斜率对参数 E 和 Δu_x 敏感,而对 κ 和 h 的敏感性较小,几乎可忽略不计。

当多参数组合发生变化时(组别8~28),组别14,19,23,26和28是引起峰值荷载和最大位移变化较大的几种组合形式,这些组合中都同时包含了 E 和 G_c 。类似的,含 E 或 Δu_x 的组别8,13,14,18,19,22,23,25~28也是引起直线段斜率变化较大的组合形式。由此可见,在多个参数共同作用时,这些参数仍是决定各敏感性评价指标变化的主要因素。然而从具体的数值上来看,这几种组合方式对各评价指标的作用程度又不尽相同,这反映了各参数间会相互作用,共同影响模型输出结果。另

合实际规律。

5 模型参数敏感性分析

考虑脆性材料相场断裂模型包含诸多参数,在应用此模型时存在校正工作量大的问题。采用 Morris 法^[26]对影响荷载-位移关系的相场断裂模型参数进行全局敏感性分析,并以验证的剪切模型作为敏感性分析基本工况。选取的影响参数包括 E , ν , G_c , l_0 , κ , h 和 Δu_x 。在进行数值计算时,各参数按照基本工况增加 10% 进行求解,这样既能获得可信的分析结果,又能简化计算^[27]。由于各参数单位不同,难以比较各参数敏感程度,需对评价指标进行归一化处理,本文采用评价指标的改变值与初始值的比值对敏感程度进行衡量。

根据 Morris 法计算原理,将各参数组合代入相场断裂模型中,依次进行求解,可得各参数及参数间相互作用的敏感性。图8给出了利用 Morris 法得到的 28 种参数组合及全局敏感性计算结果。

外,从组别28来看,尽管所有参数均增加 10%,但对各评价指标变化反而会小于某些组别。由单个参数的变化分析可知,参数与各评价指标存在正负相关两种关系,故认为这种现象是由于多个参数相互制约引起的,但又不是简单的数值叠加。

6 结论

(1) 基于 COMSOL 实现的相场断裂模型能够对脆性材料单元的裂缝萌生和扩展断裂过程进行合理反映,并且准确可靠地模拟出脆性材料断裂过程中的位移-荷载关系与裂纹扩展路径,验证了模型开发的合理性。

(2) 模型中杨氏模量 E 、临界能量释放率 G_c 和位移增量 Δu_x 对输出的位移-荷载结果影响较大,而泊松比 ν 、长度尺度参数 l_0 、模型参数 κ 和网

格密度 h 是模型输出敏感性较小的参数。因此,在提高材料断裂性能或模型参数反演过程中,应重点关注参数 E, G_c 和 Δu_r 。

(3) 脆性材料相场断裂模型在 COMSOL 的实现将为后续考虑更多物理场问题奠定基础,如考虑渗流模块可以研究脆性材料的相场水力劈裂模型,在此基础上添加化学场模块可以进一步研究水工混凝土结构在化学侵蚀作用下的裂纹扩展机理。

参考文献(References):

- [1] Zhang X, Sloan S W, Vignes C, et al. A modification of the phase-field model for mixed mode crack propagation in rock-like materials[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2017, **322**: 123-136.
- [2] 张 豪,于继东,裴晓阳,等.相场断裂方法发展概况[J]. *高压物理学报*, 2019, **33**(3): 128-139. (ZHANG Hao, YU Ji-dong, PEI Xiao-yang, et al. An overview of phase field approach to fracture[J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2019, **33**(3): 128-139. (in Chinese))
- [3] Fan R, Fish J. Thers-method for material failure simulations[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2008, **73**(11): 1607-1623.
- [4] Liu Y, Filonova V, Hu N, et al. A regularized phenomenological multiscale damage model[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2014, **99**(12): 867-887.
- [5] Xu X P, Needleman A. Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1994, **42**(9): 1397-1434.
- [6] Camacho G T, Ortiz M. Computational modelling of impact damage in brittle materials[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1996, **33**(20-22): 2899-2938.
- [7] Branco R, Antunes F V, Costa J D. A review on 3D-FE adaptive remeshing techniques for crack growth modelling [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2015, **141**: 170-195.
- [8] Song J H, Wang H W, Belytschko T. A comparative study on finite element methods for dynamic fracture [J]. *Computational Mechanics*, 2008, **42**(2): 239-250.
- [9] Sam C H, Papouli A K D, Vavasis S A. Obtaining initially rigid cohesive finite element models that are temporally convergent[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2005, **72**(14): 2247-2267.
- [10] Belytschko T, Black T. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1999, **45**(5): 601-620.
- [11] 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**(1): 131-150.
- [12] Wu J Y, Feng M M, Yu B Y, et al. The length of pre-existing fissures effects on the mechanical properties of cracked red sandstone and strength design in engineering[J]. *Ultrasonics*, 2018, **82**: 188-199.
- [13] 刘国威,李庆斌,左 正.相场断裂模型分步算法在 ABAQUS 中的实现[J]. *岩石力学与工程学报*, 2016, **35**(5): 1019-1030. (LIU Guo-wei, LI Qing-bin, ZUO Zheng. Implementation of a staggered algorithm for a phase field model in ABAQUS[J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2016, **35**(5): 1019-1030. (in Chinese))
- [14] 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**(45-48): 2765-2778.
- [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**(10): 1273-1311.
- [16] Liu G W, Li Q B, Msekh M A, et al. Abaqus implementation of monolithic and staggered schemes for quasi-static and dynamic fracture phase-field model [J]. *Computational Materials Science*, 2016, **121**: 35-47.
- [17] 费 康,刘汉龙,孔纲强,等.热力耦合边界面模型在 COMSOL 中的开发应用[J]. *岩土力学*, 2017, **38**(6): 1819-1826. (FEI Kang, LIU Han-long, KONG Gang-qiang, et al. Implementation of a thermo-bounding surface model in COMSOL [J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2017, **38**(6): 1819-1826. (in Chinese))
- [18] 焦会青,盛 钰,赵成义,等.基于 COMSOL 软件的绿洲盐渍化土壤中多离子耦合运移模型构建[J]. *农业工程学报*, 2018, **34**(15): 100-107. (JIAO Hui-qing, SHENG Yu, ZHAO Cheng-yi, et al. Modeling of multiple ions coupling transport for salinized soil in oasis based on COMSOL [J]. *Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering*, 2018, **34**(15): 100-107. (in Chinese))
- [19] Francfort G A, Marigo J J. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, **46**(8): 1319-1342.

- [20] Borden M J, Verhoosel C V, Scott M A, et al. A phase-field description of dynamic brittle fracture[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, **217-220**: 77-95.
- [21] 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**(5): 337-353.
- [22] Nguyen T T, Yvonnet J, Zhu Q Z, et al. A phase field method to simulate crack nucleation and propagation in strongly heterogeneous materials from direct imaging of their microstructure[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2015, **139**: 18-39.
- [23] Zhang W B, Shen Z Z, Ren J, et al. Phase-field simulation of crack propagation in quasi-brittle materials: COMSOL implementation and parameter sensitivity analysis[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2021, **29**(5): 055020.
- [24] Molnár G, Gravouil A. 2D and 3D Abaqus implementation of a robust staggered phase-field solution for modeling brittle fracture[J]. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2017, **130**: 27-38.
- [25] 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**(12): 906-924.
- [26] Morris M D. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments [J]. *Technometrics*, 1991, **33**(2): 161-174.
- [27] 吴志伟, 宋汉周. 基于全局灵敏度分析的大坝温度场影响因子探讨[J]. *水利学报*, 2011, **42**(6): 737-742. (WU Zhi-wei, SONG Han-zhou. Determination of impact factors on temperature field in dam based on global sensitivity analysis method [J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2011, **42**(6): 737-742. (in Chinese))

A phase-field fracture model for brittle materials based on COMSOL

ZHANG Wen-bing^{*1,2}, SHEN Zhen-zhong², XU Li-qun²,

ZHANG Hong-wei², GAN Lei², LI Ge-hang³

(1. College of Ocean Science and Engineering, Shanghai Maritime University, Shanghai 201306, China;

2. College of Water Conservancy and Hydropower Engineering, Hohai University, Nanjing 210088, China;

3. Shanghai Embankment Pump Gate Construction & Operation Center, Shanghai 200080, China)

Abstract: The phase-field method (PFM) describes the material fracture process through a series of differential equations, which avoid tedious crack surface tracing and have advantages in simulating crack initiation, propagation, and bifurcation. This paper introduced a fracture model for brittle materials based on the PFM, gave the derivation process of the governing equations of the PFM for the brittle material fracture problem, and proposed a method to implement the phase-field fracture model for brittle materials in COMSOL based on the staggered algorithm. The cracking process of the brittle material one element model and the single-edge notched plate subjected to tensile and shear are reproduced, and the simulated crack propagation path is consistent with the results of the existing literature, which verifies the rationality of the computer program. For many parameters involved in the phase-field fracture model of brittle materials, a global sensitivity analysis based on the Morris method is carried out to identify the main factors of the phase-field fracture model pertinent to the load-displacement relationship. The results show that the Young's modulus (E), critical energy release rate (G_c) and displacement increment (Δu_x) are the main parameters that affect the output results of the load-displacement relationship. The phase-field fracture model implemented in COMSOL can effectively simulate the crack initiation and propagation in brittle materials, and the model parameters E , G_c and Δu_x have an important impact on the improvement of the fracture performance of the material and the efficiency of the inversion of the model parameters.

Key words: brittle materials; phase-field method; COMSOL; numerical simulation; sensitivity analysis

引用本文/Cite this paper:

张文兵, 沈振中, 徐力群, 等. 基于 COMSOL 的脆性材料相场断裂模型[J]. *计算力学学报*, 2023, **40**(2): 273-280.

ZHANG Wen-bing, SHEN Zhen-zhong, XU Li-qun, et al. A phase-field fracture model for brittle materials based on COMSOL [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2023, **40**(2): 273-280.