



取向构元组集模型的弹性损伤理论

邓守春^{①*}, 刘金兴^①, 张晶^①, 付强^①, 梁乃刚^①, 卢海星^②

① 中国科学院力学研究所高温气体动力学实验室, 北京 100190;

② 军械工程学院研究生院, 石家庄 050003

* E-mail: dengsc@imech.ac.cn

收稿日期: 2008-03-25; 接受日期: 2008-08-28

国家自然科学基金(批准号: 10572140, 10232050)和国家科技部项目(编号: 2002CB412706)资助

摘要 “对泛函势”是多种材料势能的很好近似. 在计算材料势能过程中, 分别由对势和嵌入势抽象出取向构元和体积构元, 这两种构元的能量和就是材料的势能. 材料损伤的本质是原子键合力的破坏, 由于取向构元是原子间键的抽象, 反映在构元层次上, 损伤是构元刚度的减小. 组集所有构元的响应函数, 得到了材料的弹脆性损伤本构关系, 这种基于构元组集的材料本构被称为“取向构元组集”材料模型. 理论分析和数值实验表明, 本模型具有概念清晰, 物理直观, 以及表示各向异性自然等特点.

关键词

对泛函势
对势
嵌入势
损伤
各向异性
取向构元
体积构元
取向构元组集模型

材料的微观组织结构在外界因素作用下发生改变^[1-4], 该过程发展到一定程度后, 材料内部的微孔洞等缺陷不断出现, 材料的力学性能劣化, 材料性能持续劣化到一定程度时, 这些微孔洞微裂纹不断增加并开始汇合, 继而出现宏观裂纹, 并最终导致失效. 材料力学性能退化的过程称为损伤过程, 损伤的发生发展将导致材料的力学性能出现方向性——各向异性.

损伤力学是主要研究材料在外界作用下力学性能劣化过程的学科. 自 1958 年 Kachanov^[5]提出“损伤因子”的概念开始, 损伤力学经过数十年的发展, 已经取得了令人瞩目的成绩, 并针对不同类型的损伤提出了众多的理论模型, 典型的有: Lemaitre-Chaboche 塑性损伤理论^[2-4,6-9], Kachanov 蠕变损伤理论^[3,5,8-10]、Rousselier 损伤理论^[3]、Gurson 模型^[3,11]、临界空穴扩张比理论^[3]、Murakami-Ohno 蠕变损伤理论^[2,3,7,9]、Chaboche 各向异性损伤理论^[6]、Krajcinovic

矢量损伤理论^[4]以及 Sidoroff 各向异性损伤理论^[3,8]等等. 这些理论模型主要是基于传统连续介质力学^[12,13]知识得到的(Gurson 模型和“临界空穴扩张比理论”基于细观力学). 但是, 连续介质损伤理论也存在一些不足: 首先, 损伤的定义不唯一, 这些唯象的定义未必是物理真实的; 其次, 建立损伤等的演化方程一般是通过假设一个与之对应的耗散势, 而这个耗散势的形式具有某种程度的人为性; 重要的是, 建立在应力(应变)场空间里的连续介质损伤理论公式复杂, 有些情况下所采取的(对有效应力的)对称化处理缺乏物理根据, 这在各向异性损伤理论中十分明显.

原子间的键合力决定了材料的结构以及其内禀的力学与电磁学等性质^[14-16]. 由众多各类原子组成的材料被处理为“多体系”. 准确求解该多体系需要求解所有原子的薛定谔方程^[14,16,17], 并考虑所有带电粒子(原子核和电子)之间的相互作用及其动能. 然而, 由 Born-Oppenheimer 近似^[14,16], 波动方程可以分为两部

分: 一部分描述轻的电子而另一部分描述重的原子核. 由于电子运动远比原子核快而认为其是瞬间平衡的, 波动方程得以准经典处理而只需要考虑原子间的相互作用力(各种势理论). 势理论反映了两个或多个原子间的相互作用规律, 一般表示为原子间相对位置的函数. 原子间势理论中的参数可以通过拟和材料参数如弹性常数, 晶格常数, 内聚能, 堆垛层错能等方法得到. 材料的性质不仅受化学组成而且受微结构的影响, 微结构在外部作用下演化并改变着材料的性质. 无论是微结构改变, 损伤或破坏, 从根本上, 它们都是原子间键合力的改变和破坏^[14,15].

基于各种势理论对材料性质的研究, 如分子动力学模拟^[14,15,18]得到了长足的发展, 现在模拟的规模已达到 10^9 个原子的规模. 从另一个角度, 受限于计算机的计算和存储能力, 目前所能模拟的原子数目离实际需要还有相当差距, 模拟的时间也很短暂, 距离工程应用还有相当距离. 在这种情况下, 直接利用原子尺度的势理论建立材料的宏观本构模型的方法变得很有吸引力, 现在, 关于这方面的工作已有一些代表性的成果: Miller 等人^[19,20]建立了“准连续介质(quasicontinuum, QC)”模型, 它通过与连续介质模型分区(在塑性滑移或裂纹尖端用准连续介质模型而在其他区域用连续介质本构)求解的方法, 模拟了裂纹扩展和塑性等问题; Chen 等人^[21,22]建立了分子动力学量和微形态(micromorphic)理论之间的关系; Gao 等人^[23]基于“对势”理论而提出了“虚内键(virtual internal bond, VIB)”模型并用于断裂问题, 从严格意义上, “虚内键”模型是一种结构模型.

基于“对泛函势”理论^[14,16], 本文提出了“取向构元组集”模型. 由“对泛函势”理论, 材料的势能可近似表示为原子间的“对势”和“嵌入势”的和. 基于方向(而不是体积)统计“对势”和, 进而抽象出“取向构元”, 即, 在所选体积微元中, 平行于该取向构元的所有“对势”的和作为取向构元的能量; 同理, 由“嵌入势”而得到了抽象的“体积构元”. 取向构元是典型的一维构元而承受拉压载荷, 体积构元是典型的三维构元, 它对静水应力有响应. 材料的本构关系通过几何组集这两类构元的响应函数(本构)而得到. 既然损伤在本质上是原子间键合力的变化和破坏, 而取向构元

的刚度由它所代表的那些原子键的强度决定, 自然地, 损伤的过程可以由取向构元性质的不断改变代表. 另外, 损伤所诱导的各向异性实际上是各方向上原子键破坏程度不同的结果, 它表现为各方向上的取向构元刚度不一致, 因此, “取向构元组集”模型自然地描述了损伤及其诱导的各向异性现象.

1 取向构元组集模型的理论推导

许多种材料的势能可以表示成“对泛函势”形式. 对泛函势的一个主要观点是原子的嵌入势能量由嵌入原子所在处的局域电子密度所决定^[14-16]:

$$E_{\text{embedding}} = F(\rho), \quad (1)$$

上式中, $F(\rho)$ 为嵌入能量函数, 它用于表征嵌入的原子与密度为 ρ 的局域电子间的相互吸引作用. 在此, 可进一步假设第 i 个原子核处的电子云密度为

$$\rho_i = \sum_j^{j \neq i} f(R_{ij}). \quad (2)$$

显然, 第 i 个原子核处的电子云密度由其周围各原子的球形对称电荷密度 $f(R)$ 叠加而成. 因此, 函数 $f(R)$ 表示了原子 j 的电子在原子 i 处的分布, 且该函数只与两原子间的距离 $R_{ij} = |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| = R^{(i,j)}$, ($i \neq j$) 有关, 其中 \mathbf{R}_i 为第 i 个原子的位置矢量. 由“嵌入原子”方法, 总的势能有如下形式:

$$\begin{aligned} E_{\text{exact}}(\mathbf{R}_i, \mathbf{r}_n) &\rightarrow E_{\text{approx}}[\mathbf{R}_i, \rho(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij}^{i \neq j} \phi(R_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \end{aligned} \quad (3)$$

其中项 $\phi(R_{ij})$ 表示相距为 R_{ij} 的一对原子间的相互(排斥)作用势(对势), \mathbf{r}_n 是第 n 个电子的位置矢量.

实际应用过程中, 我们最感兴趣的是偏离平衡位置所引起的改变, 因此, 把初始平衡时的能量处理为零会带来方便. 对(3)式作 Taylor 展开, 由于是在平衡位置附近的小扰动, 由虚功原理, 有 $\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial \mathbf{R}} \cdot \delta \mathbf{R} = 0$. 于是, 由变形引起的势能(应变能)可以表示为(三阶及以上忽略)

$$U = \frac{1}{4} \sum_{(\alpha, \beta)}^{\alpha \neq \beta} \phi''(R^{(\alpha, \beta)}) [\delta \mathbf{R}^{(\alpha, \beta)}]^2$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{4} \sum_{(\alpha, \beta)}^{\alpha \neq \beta} \phi'(R^{(\alpha, \beta)}) \delta^2 R^{(\alpha, \beta)} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) [\delta \rho^{(\alpha)}]^2 \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \delta^2 \rho^{(\alpha)}. \tag{4}
 \end{aligned}$$

在求对势和时, 若选取的材料单元足够大, 由于原子密度巨大, 原子间相互作用的方向遍布整个空间; 相反地, 若材料单元内只有数个原子, 则对势的方向数也少. 这就给我们一个启示: 可基于方向来计算对势的和! 这也是本文所提模型的一个基本思想. 显然, 这个过程跨越了数个尺度. 具体地, 为求对势的和可任意给定一个单位方向矢量 \mathbf{m} , 并“建立”一个该方向上的取向构元, 平行于 \mathbf{m} 的所有原子间对势的和就是该取向构元的能量, 记为

$$\begin{aligned}
 E^{(\mathbf{m})} = \frac{1}{4} \sum_{(\alpha, \beta)}^{R^{(\alpha, \beta)} // \mathbf{m}} \left\{ \phi''(R^{(\alpha, \beta)}) [\delta R^{(\alpha, \beta)}]^2 \right. \\
 \left. + \phi'(R^{(\alpha, \beta)}) \delta^2 R^{(\alpha, \beta)} \right\}. \tag{5}
 \end{aligned}$$

遍历所有相互作用的原子对, 并建立众多的取向构元. 这时, 因变形所引起的对势改变 U_p 可以用取向构元表示:

$$\begin{aligned}
 U_p = \frac{1}{4} \sum_{(\alpha, \beta)}^{\alpha \neq \beta} \left\{ \phi''(R^{(\alpha, \beta)}) [\delta R^{(\alpha, \beta)}]^2 \right. \\
 \left. + \phi'(R^{(\alpha, \beta)}) \delta^2 R^{(\alpha, \beta)} \right\} = \sum_{\mathbf{m}} E^{(\mathbf{m})}. \tag{6}
 \end{aligned}$$

于是, 单位体积的应变能(密度)可写作如下形式:

$$\begin{aligned}
 U = U_p + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) [\delta \rho^{(\alpha)}]^2 \\
 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \delta^2 \rho^{(\alpha)} \\
 = \sum_{\mathbf{m}} E^{(\mathbf{m})} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) [\delta \rho^{(\alpha)}]^2 \\
 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \delta^2 \rho^{(\alpha)}. \tag{7}
 \end{aligned}$$

在建立微观位移和宏观变形间关系的过程中, Cauchy-Born 假设^[14~16, 24~29]起到了桥梁的作用. 该假设认为微观上的晶格变形具有均匀性并服从局域的宏观变形梯度, 如图 1 和 2 所示. 记

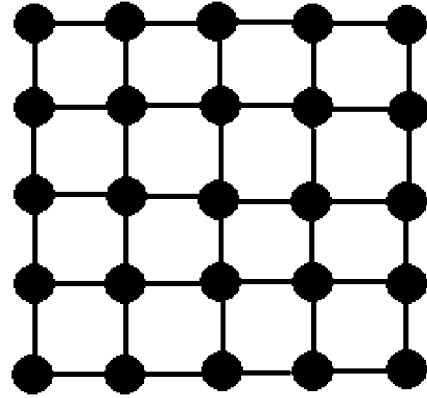


图 1 变形前晶格

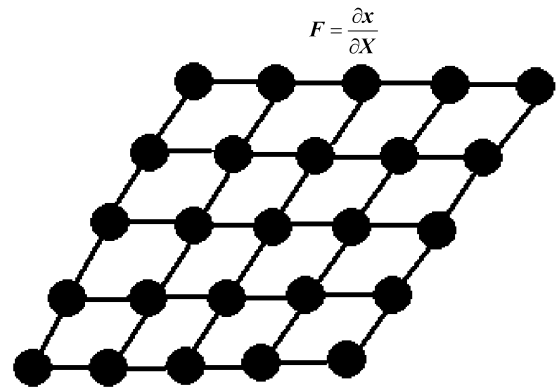


图 2 变形后晶格(Cauchy-Born 假设)

$$\begin{aligned}
 H^{(\mathbf{m})} = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta)}^{R^{(\alpha, \beta)} // \mathbf{m}} \left\{ \phi''(R^{(\alpha, \beta)}) [R^{(\alpha, \beta)}]^2 \right. \\
 \left. - \phi'(R^{(\alpha, \beta)}) R^{(\alpha, \beta)} \right\} = 2E^{(\mathbf{m})}. \tag{8}
 \end{aligned}$$

将式(8)代入式(7)中, 并考虑 Cauchy-Born 假设, 有

$$\begin{aligned}
 U = \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{m}} H^{(\mathbf{m})} m_i m_j m_k m_l \right. \\
 + \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) (\rho^{(\alpha)})^2 \right. \\
 \left. + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \rho^{(\alpha)} \right] \delta_{ij} \delta_{kl} \left\} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}, \tag{9}
 \end{aligned}$$

其中 m_i 是矢量 \mathbf{m} 的第 i 个分量. 利用能量等效并与连续介质力学对比, 得到下面结果:

$$C_{ijkl} = \sum_{\mathbf{m}} H^{(\mathbf{m})} m_i m_j m_k m_l$$

$$+ \left[\sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) (\rho^{(\alpha)})^2 + \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \rho^{(\alpha)} \right] \delta_{ij} \delta_{kl}. \quad (10)$$

上式中的第一项由对势得到, 后面两项得自于嵌入势. 实际上, $H^{(m)}$ 就是平行于 m 方向的取向构元的弹性模量. 类似的, 引入体积构元以代表嵌入势的贡献, 其体积模量为

$$K = \sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) (\rho^{(\alpha)})^2 - \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \rho^{(\alpha)}. \quad (11)$$

材料的弹性张量用取向构元和体积构元表达, 它是四阶张量, 并满足 Voigt 对称性: $C_{ijkl} = C_{klij} = C_{ijlk} = C_{jilk}$. 进而, 式(10)可以写成如下形式:

$$C_{ijkl} = \sum_m H^{(m)} m_i m_j m_k m_l + K \delta_{ij} \delta_{kl}. \quad (12)$$

式(10)和(12)对所有可用“对泛函势”近似的材料都成立! 只要该材料的原子位移服从 Cauchy-Born 假设.

由于体积构元的存在, 式(10)得以克服 Cauchy 关系: $C_{ijkl} = C_{ikjl}$ 的约束. 由式(10)可知, 其弹性张量有 16 个不同的分量, 而有一个对称面的材料其弹性常数是 13 个, 因此, 这种组集式模型可以很好描述多种材料.

2 取向构元组集模型的参数及与其他模型 的比较

一旦对泛函势函数和晶格构形给定, 则晶体材料的性质可以直接得到. 真实的材料都是不均匀和各向异性的, 但许多材料在宏观上又表现为各向同性, 如金属材料^[1,15]. 当所取材料单元足够大, 材料单元内包含足够多的晶粒, 且晶粒取向均匀分布, 材料可视为均匀材料, 对势的方向遍布整个空间, 即取向构元的数目趋向无穷, 方程(7)应写成积分形式, 下面将进行讨论. 此时, 前面诸式可以写成积分形式:

$$\begin{aligned} H(\theta, \varphi) \Delta\Omega &= H(\theta, \varphi) \sin \varphi \Delta\theta \Delta\varphi \\ &= \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \Delta\Omega} \left\{ \phi''(R^{(\alpha, \beta)}) (R^{(\alpha, \beta)})^2 \right. \\ &\quad \left. - \phi'(R^{(\alpha, \beta)}) R^{(\alpha, \beta)} \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

这里, $\Delta\Omega$ 为绕 (θ, φ) 方向的一个小的立体角. 同时, 有

$$K(\theta, \varphi) = \sum_{\alpha} F''(\rho^{(\alpha)}) (\rho^{(\alpha)})^2 + \sum_{\alpha} F'(\rho^{(\alpha)}) \rho^{(\alpha)}. \quad (14)$$

因嵌入势只和体积相关, 在小应变情况下, 可认为有

$$K(\theta, \varphi) = K \equiv \text{const}. \quad (15)$$

式(10)或(14)的求和形式变成如下的积分形式:

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\pi} H(\theta, \varphi) m_i(\theta, \varphi) m_j(\theta, \varphi) m_k(\theta, \varphi) \\ &\quad \cdot m_l(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi + K \delta_{ij} \delta_{kl}. \quad (16) \end{aligned}$$

式(16)为均匀材料的本构方程. 由于一个取向构元只代表着该方向上原子间对势的贡献, 因此, 宏观均匀材料中的取向构元遍布整个空间. 然而, 在数值计算过程中, 积分转化为离散求和运算, 即, 选取若干代表性方向并设立相应的取向构元, 经过分析计算发现, 当平面取 12 个或空间取 46 个取向构元时就能保证很高的精度, 图 3 和 4 分别给出了平面和空间的取向构元分布. 其刚度表示为

$$\begin{aligned} H(\theta, \varphi) \Delta\Omega &= H(\theta, \varphi) \sin \varphi \Delta\theta \Delta\varphi \\ &= \frac{1}{2} \sum_{(\alpha, \beta) \in \Delta\Omega} \left\{ \phi''(R^{(\alpha, \beta)}) (R^{(\alpha, \beta)})^2 \right. \\ &\quad \left. - \phi'(R^{(\alpha, \beta)}) R^{(\alpha, \beta)} \right\}, \quad (17) \end{aligned}$$

材料的本构方程仍具有式(10)或(12)的形式. 进一步, 对各向同性材料, 此时有 $H(\theta, \varphi) = H = \text{const}$.

方程(16)在上半个单位球面积分, 得到

$$C_{ijkl} = \left(\frac{2\pi}{15} H + K \right) \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{2\pi}{15} H (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (18)$$

经比较^[12,13], 有

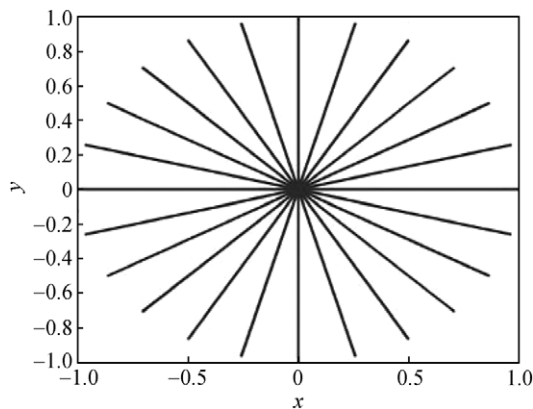


图 3 取向构元平面离散示意图

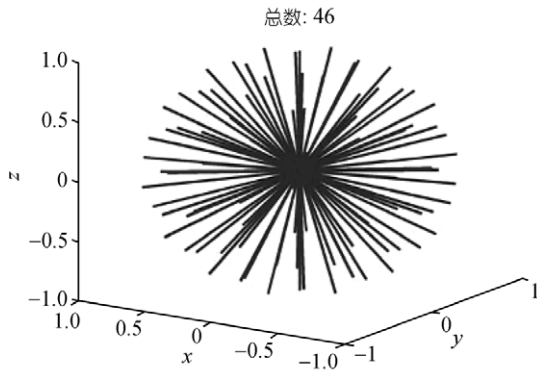


图 4 取向构元空间离散示意图

$$\begin{cases} H = \frac{15}{2\pi} \mu, \\ K = \lambda - \mu, \end{cases} \quad (19)$$

这里, λ 和 μ 为 Lamé 常数.

这里需要强调指出的是, 在建立本模型时采用了 Cauchy-Born 假设, 而该假设使用范围有限, 但本模型可以克服 Cauchy-Born 假设的限制, 如果采用“修改的”Cauchy-Born 假设^[24~29], 如基于积分中值定理的 Cauchy-Born 假设^[24]和高阶型的 Cauchy-Born 假设^[26]应用于非均匀变形“准连续介质”模型, 它已经成功用在位错动力学, 塑性滑移和纳米压痕等的分析与模拟^[19,20]; 指数型的 Cauchy-Born 假设^[29]成功用于薄壁碳纳米管的褶皱变形分析中; 考虑温度变化影响的 Cauchy-Born 假设^[27]应用于温度变化显著的情形等. 值得注意的是, Chen 等人^[21,22]用统计力学的方法证明了当原子位移在统计平均意义上服从宏观变形梯度的约束则可以建立分子动力学和宏观连续介质理论之间的联系, 从而进一步扩大了 Cauchy-Born 假设的应用范围.

由于晶粒中原子的规则排列, 原子间的相互作用方向数目有限, 如体心立方晶格中原子键的作用方向数为 13 个(只考虑近邻, 次近邻和再次近邻的原子相互作用), 此时取向构元数目为 13 个, 类似地可确定面心立方, 密排六方等晶格的原子键方向数目. 当统计能量的材料单元足够大, 材料可视为均匀材料时, 此时键的方向数目遍布整个空间. 为便于数值模拟, 需要选取代表性方向以在这些方向上设立取向构元. 确定构元数目的基本原则是: 确保原子间对势能的统计具有足够精度. 计算表明, 对初始各向同

性材料, 平面问题选取 12 个取向构元(图 3)和空间问题选取 46 个取向构元(图 4)就可以了. 对于由 20 个正六边形和 12 个正五边形所组成的足球, 球心和这些多边形的顶点和中心的连线的数目正好是 46 个且分布均匀(图 4). 对于初始各向异性材料, 各取向构元的初始刚度不同, 可先依据材料对称性对构元分组, 再优化求解式(10), 得到各组构元的刚度. 为获得取向构元的响应函数曲线, 一般采用曲线拟和的方法进行标定. 具体地, 根据材料的实验曲线, 假设取向构元的响应函数形式(一般设为分段函数), 然后作数值优化以匹配实验曲线, 后面的数值算例就是通过这种方法得到的.

取向构元组集模型, 虚内键模型和准连续介质模型有相同的物理基础, 它们都源自原子间势函数理论. 相对于虚内键模型, 由于在取向构元组集模型考虑了嵌入势而使得其不受 Cauchy 关系约束; 本模型与准连续介质模型的分组策略不同, 准连续介质模型对原子分组的策略是按原子势能大小分组, 取向构元组集模型依原子键的方向分组, 同时, 本模型数值实现较准连续介质模型简单. 取向构元组集模型和“微平面(microplane)”模型^[30~33]一样, 它们的基本研究单位都不是“代表性体元(representative volume element, RVE)”, 微平面模型的研究单位是一个个离散的微平面, 其运动学, 动力学和本构方程(弹性、塑性和损伤等)都建立在各平面上; 本模型以取向构元和体积构元为基本研究单位, 材料的本构方程由这些构元的响应函数组集得到. “内聚区(cohesive zone)”模型^[34~37]广泛用于断裂的模拟, 它可由原子间势得到. 内聚区模型用内聚区的本构表示材料体积上的能量耗散, 与之相比, 本模型还可以再现材料损伤所诱导的各向异性现象等.

3 取向构元组集模型的弹脆性损伤理论

在工程结构断裂之前, 其微结构一般会发生显著的变化. 如混凝土中所出现的微裂纹, 复合材料中的纤维拔出或脱层, 以及韧性材料中空洞的形成等. 只有充分考虑了这些微结构的损伤才有可能做出准确的失效预测, 这种客观需要导致了连续介质损伤力学的发展, 其中, 断裂被看作材料性能连续退化的结果. 在连续介质损伤力学中, 通过引入一些场变量

(损伤变量), 使材料局部整体性的丧失得以显式表达. 当材料中某处的损伤达到确定的临界值时就认为该处出现一条裂纹, 裂纹处的材料失去承载能力. 应力的重新分布会进一步导致裂纹尖端附近的变形集中及损伤演化, 并且, 该过程区的应力及损伤决定了裂纹扩展的方向和速度. 这样, 用连续介质力学自然地描述了裂纹的萌生及增长, 而不是通过引入一些缺乏联系的断裂准则.

无论材料微结构演化, 还是损伤和断裂, 从根本上, 它们都是原子键的改变和破坏, 而取向构元实际是原子键的抽象. 当原子开始脱键, 对应的取向构元开始改变其(力学)性质, 如刚度降低, 原子脱键越多, 则取向构元的刚度改变就越大, 因此,

$$D = 1 - \frac{H}{H_0}, \quad (20)$$

其中 D 为取向构元的损伤因子, $0 \leq D \leq 1$; H 为它的当前(损伤)卸载刚度, 而 H_0 为对应的初始无损刚度, 如图 5 所示. 取向构元是一类典型的一维构元, 它只能承受拉压载荷, 因此它的响应函数非常简单, 并总可以写成如下形式:

$$\sigma_m = H \varepsilon_m = (1 - D) H_0 \varepsilon_m, \quad (21)$$

上式中, 已知 \mathbf{m} 为取向构元的单位方向矢量, σ_m , ε_m 分别为取向构元的应力和应变. 显然, 有

$$\varepsilon_m = \varepsilon_{ij} m_i m_j, \quad (22)$$

其中 ε_{ij} 为应变场分量. 不失一般性, 拉伸和压缩都可导致取向构元的损伤, 且损伤规律可以不一样. 由于取向构元的一维特性, 其损伤是其最大拉伸应变或最小压缩应变的函数, 拉伸和压缩的损伤阈值分

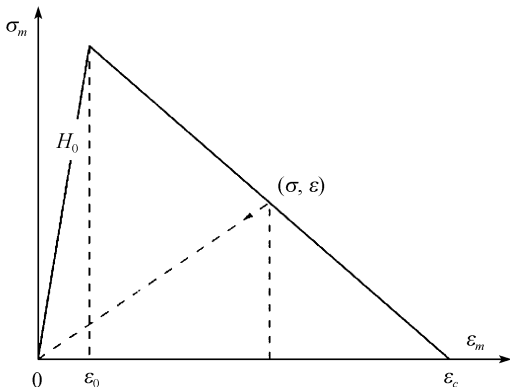


图 5 取向构元损伤定义示意图

别为 ε_{+cr} 和 ε_{-cr} (随着损伤演化而变化). 于是, 损伤演化方程有下面形式:

$$D = D_1(\varepsilon_{+cr}) = D_2(\varepsilon_{-cr}). \quad (23)$$

对整个变形历史 $\varepsilon_{ij}(t)$, 有

$$\varepsilon_{+cr} = \max(\varepsilon_m(t)) = \max(\varepsilon_{ij}(t) m_i m_j)$$

和

$$\varepsilon_{-cr} = \min(\varepsilon_m(t)) = \min(\varepsilon_{ij}(t) m_i m_j).$$

于是, 取向构元的损伤因子也可以表示为如下形式:

$$D = D(\mathbf{Q}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}), \quad (24)$$

其中 $\mathbf{Q} = \mathbf{m} \otimes \mathbf{m}$ 是取向构元的运动学张量; 而 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}$ 是与取向构元相关的特征应变张量(内变量), 对相同的变形历史, 各取向构元对应的 $\boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}$ 可不同, 但它使得 $\mathbf{Q} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(m)} = \varepsilon_{+cr} (= \varepsilon_{-cr})$ 成立.

对应地, 有损伤条件:

$$f(\varepsilon_m, \varepsilon_{cr}) = \begin{cases} \varepsilon_m - \varepsilon_{+cr} \leq 0, & \text{拉伸时,} \\ \varepsilon_{-cr} - \varepsilon_m \leq 0, & \text{压缩时.} \end{cases} \quad (25)$$

损伤阈值总和当前应变同符号, 拉伸时有 $\varepsilon_{cr} = \varepsilon_{+cr}$, 压缩时 $\varepsilon_{cr} = \varepsilon_{-cr}$.

另外, 有 Kuhn-Tucker 条件:

$$\dot{D} \geq 0, \quad f(\varepsilon_m, \varepsilon_{cr}) \leq 0, \quad \dot{D} f(\varepsilon_m, \varepsilon_{cr}) = 0. \quad (26)$$

若满足单边性条件, 这意味着, 裂纹的闭合效应不予考虑. 拉伸损伤时压缩损伤阈值也要相应变化, 反之亦然. 损伤阈值演化由下式给出:

$$\dot{D} = \frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \dot{\varepsilon}_{cr}. \quad (27)$$

损伤的一致性条件是

$$\dot{D} f(\varepsilon_m, \varepsilon_{cr}) = 0, \quad \text{当 } f(\varepsilon_m, \varepsilon_{cr}) = 0 \text{ 时.} \quad (28)$$

小位移情况下, 微分式(18), 并考虑式(19), 持续损伤时有

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_m &= (1 - D) H_0 m_i m_j \dot{\varepsilon}_{ij} - H_0 \varepsilon_m \dot{D} \\ &= \left[(1 - D) H_0 - H_0 \varepsilon_m \frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right] m_i m_j \dot{\varepsilon}_{ij}. \end{aligned} \quad (29)$$

单个取向构元的应力对整个应力场的贡献为

$$\sigma_{ij} = \sigma_m m_i m_j. \quad (30)$$

体积构元的刚度和体积相关, 小变形情形下其

刚度改变可以忽略不计. 组集所有取向构元和体积构元的应力, 得到材料本构方程的率形式:

$$\dot{\sigma}_{ij} = \left\{ \sum_{s=1}^M \left[(1-D^s) H_0^s - H_0^s \varepsilon_m^s \left(\frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right)^s \right] \cdot m_i^s m_j^s m_k^s m_l^s + K \delta_{ij} \delta_{kl} \right\} \dot{\varepsilon}_{kl}. \quad (31)$$

相应地, 其弹脆性损伤切线刚度张量记为

$$C_{ijkl}^{ed} = \left\{ \sum_{s=1}^M \left[(1-D^s) H_0^s - H_0^s \varepsilon_m^s \left(\frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right)^s \right] \cdot m_i^s m_j^s m_k^s m_l^s + K \delta_{ij} \delta_{kl} \right\}, \quad (32)$$

上面二式中, 损伤率所诱导的刚度为 $H_0 \varepsilon_m \left(\frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right)$,

该项只出现在(持续)损伤状态. 这里需要强调的是, 虽然每个取向构元的损伤因子是一个标量(式(29)), 但在材料单元层次上, 损伤是完全各向异性的, 见式(32). 另外, 式(32)也描述了各取向构元的损伤演化规律不一致的情形, 即它们的 $\left(\frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right)$ 不相同, 而这种

材料是各向异性的.

前面只考虑了取向构元的损伤, 当材料变形较大并有显著体积改变时, 体积构元的刚度会有显著变化. 嵌入势本质上是一种库仑势, 它与粒子所带电荷成正比, 即体积膨胀, 电子云密度降低, 则嵌入势减小, 相应地, 体积构元刚度变小, 反之亦然. 有

$$K = K(\varepsilon_{ii}), \quad (33)$$

此时的弹性损伤刚度张量变为

$$C_{ijkl}^{ed} = \left\{ \sum_{s=1}^M \left[(1-D^s) H_0^s - H_0^s \varepsilon_n^s \left(\frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right)^s \right] m_i^s m_j^s m_k^s m_l^s + \left(K + \varepsilon_{qq} \frac{\partial K}{\partial \varepsilon_{pp}} \right) \delta_{ij} \delta_{kl} \right\}. \quad (34)$$

前面在推导弹性损伤过程中没有考虑裂纹的闭合效应, 即(准)单边性条件. 其实, 在取向构元组集模型中考虑裂纹闭合是简单的, 因为取向构元只有拉压两种状态. 设取向构元的闭合系数为 α , 记

$$\langle \alpha \rangle = \begin{cases} 1, & \varepsilon \geq 0, \\ \alpha, & \varepsilon < 0, \end{cases} \quad (35)$$

则式(32)成为

$$C_{ijkl}^{ed} = \left\{ \sum_{s=1}^M \left[(1-\langle \alpha^s \rangle) D^s \right] H_0^s - \langle \alpha^s \rangle H_0^s \varepsilon_n^s \left(\frac{dD}{d\varepsilon_{cr}} \right)^s \right] m_i^s m_j^s m_k^s m_l^s + \left(K + \varepsilon_{qq} \frac{\partial K}{\partial \varepsilon_{pp}} \right) \delta_{ij} \delta_{kl} \right\}. \quad (36)$$

4 数值计算方法及算例

平衡方程为

$$\sigma_{ij,j} + F_i = 0, \quad (37)$$

这里的 \mathbf{F} 系外力矢量. 用有限单元方法求解控制方程过程中, 必须施加适当的边界条件:

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{u}^b, & \mathbf{u} \in \Gamma_u, \\ \mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, & \mathbf{t} \in \Gamma_\sigma. \end{cases} \quad (38)$$

在全域 Ω 对方程(37)作加权积分, 权函数为 \mathbf{S} , 得到控制方程的弱形式:

$$\int_{\Omega} S_i (\sigma_{ij,j} + F_i) d\Omega = 0, \quad (39)$$

分部积分上式, 利用散度定理并考虑边界条件(式(38)), 有

$$\int_{\Omega} S_{i,j} \sigma_{ij} d\Omega = \int_{\Omega} S_{ij} F_i d\Omega + \int_{\Gamma} S_{ij} t_j d\Gamma. \quad (40)$$

位移场 \mathbf{u} 的有限元离散方式如下:

$$\begin{cases} u_i = N_{ij} d_j, \\ u_{i,k} = N_{ij,k} d_j, \end{cases}$$

其中 \mathbf{d} 为节点位移矢量, \mathbf{N} 为形函数张量. 利用 Bubnov-Galerkin 方法^[33], 对应的权函数作类似的离散:

$$\begin{cases} S_i = N_{ij} d_j^s, \\ S_{i,k} = N_{ij,k} d_j^s. \end{cases}$$

最终的方程必须满足所有容许节点位移 \mathbf{d}^s . 具体地, 有结果:

$$\int_{\Omega} N_{ij,k} \sigma_{ik} d\Omega = \int_{\Omega} N_{ij} F_i d\Omega + \int_{\Gamma} N_{ij} t_j d\Gamma. \quad (41)$$

为构造一致增量一迭代求解过程, 式(41)需作线性化处理. 考虑上一步结束时的结果, 在迭代步 i , 节点自由度写成如下形式:

$$d_j^i = d_j^{i-1} + \Delta d_j,$$

这将导致积分点上的应力具有如下形式:

$$\sigma_{kl}^i = \sigma_{kl}^{i-1} + \Delta \sigma_{kl}.$$

类似地, 有

$$\begin{cases} \varepsilon_{st}^i = \varepsilon_{st}^{i-1} + \Delta \varepsilon_{st}, \\ \Delta \varepsilon_{st} = \frac{1}{2} (N_{sj,t} + N_{tj,s}) \Delta d_j. \end{cases}$$

这里必须指出的是, 上标 i 表示增量/迭代步而下标 i 表示张量的分量. 考虑式(31)和上面的 3 个等式, 得到方程(41)的线性化结果为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\Omega} N_{ij,k} C_{ikst}^{ed} (N_{sp,t} + N_{tp,s}) \Delta d_p d\Omega \\ & = \int_{\Omega} N_{ij} F_i d\Omega + \int_{\Gamma} N_{ij} t_i d\Gamma - \int_{\Omega} N_{ij,k} \sigma_{ik}^{i-1} d\Omega. \end{aligned} \quad (42)$$

将式(42)写成矩阵形式:

$$[K] \{\Delta d\} = \{F^{ext}\} - \{F^{in,i-1}\} = \{R\}. \quad (43)$$

其中 $\{R\}$ 为节点残力列向量, 其他矩阵和列向量的分量定义如下:

$$K_{jp} = \frac{1}{2} \int_{\Omega} N_{ij,k} C_{ikst}^{ed} (N_{sp,t} + N_{tp,s}) d\Omega,$$

$$F_j^{ext} = \int_{\Omega} N_{ij} F_i d\Omega + \int_{\Gamma} N_{ij} t_i d\Gamma,$$

$$F_j^{in,i-1} = \int_{\Omega} N_{ij,k} \sigma_{ik}^{i-1} d\Omega.$$

通过拟合实验数据, 我们可以标定取向构元弹性损伤本构关系. 图 6 是单位长度单元受单向拉伸载荷作用的示意图, 图 7(a)和(b)分别是对应单元的应力-应变曲线^[4]和取向构元的应力-应变曲线(构元响

应函数曲线). 计算过程中, 材料的初始杨氏模量 $E = 21400 \text{ GPa}$ 和泊松比 $\nu = 0.2$, 圆杆主要发生拉伸致损伤, 在此, 压缩的影响不予考虑; 原子团间的对势用 46 个取向构元代表(图 4), 则取向构元和体积构元的初始刚度分别为 $H_0 = \frac{15}{2\pi} \frac{E}{2(1+\nu)} \frac{2\pi}{46} \approx 2907.6$

MPa 和 $K \approx -4458.3 \text{ MPa}$.

单轴拉伸实验可以确定轴向损伤杨氏模量 \tilde{E} ,

$$\begin{aligned} F &= \sigma_{11} A \\ &= A \left[\sum_{\alpha=1}^M (1-D^{(\alpha)}) H_0^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} m_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + K \delta_{kl} \right] \varepsilon_{kl} \\ &\approx \tilde{E} \varepsilon_{11} A, \end{aligned} \quad (44)$$

即

$$\begin{aligned} \tilde{E} &\approx \frac{F}{A \varepsilon_{11}} = \frac{\sigma_{11}}{\varepsilon_{11}} \\ &= \left[\sum_{\alpha=1}^M (1-D^{(\alpha)}) H_0^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} m_1^{(\alpha)} m_k^{(\alpha)} m_l^{(\alpha)} + K \delta_{kl} \right] \frac{\varepsilon_{kl}}{\varepsilon_{11}}. \end{aligned} \quad (45)$$

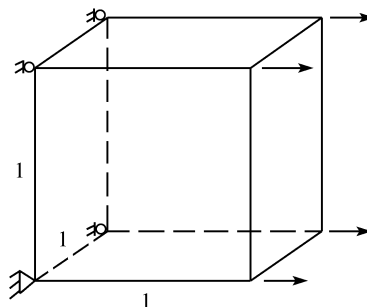


图 6 单元及边界条件示意图

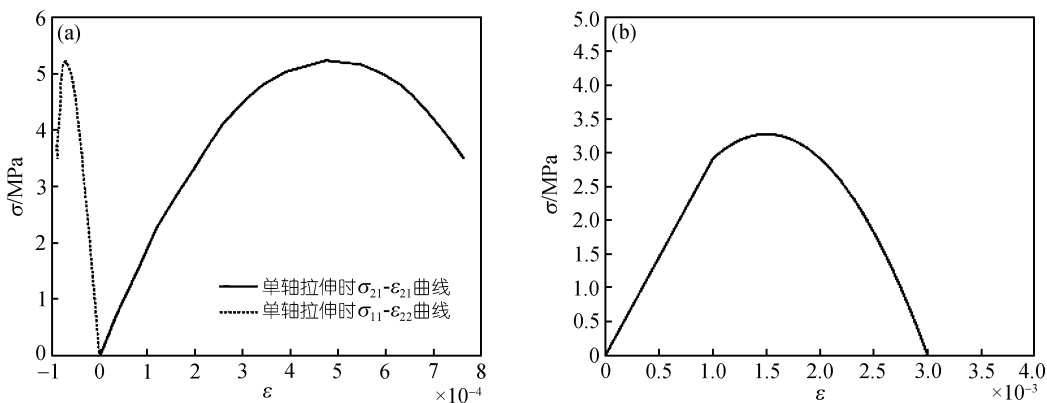


图 7 应力-应变曲线

(a) 单元; (b) 取向构元

同理, 变化着的泊松比 $\bar{\nu}$ 表示为

$$\bar{\nu} = \left| \frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} \right| = - \frac{S_{2211}^{\text{secant}}}{S_{1111}^{\text{secant}}} \quad (46)$$

图 8 是单轴拉伸时横向泊松比-轴向应变曲线.

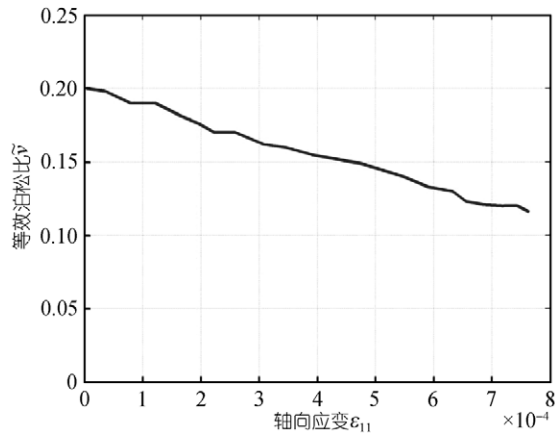


图 8 单轴拉伸时横向等效泊松比 $\bar{\nu}$ -轴向应变 ε_{11} 曲线

模型的有效性将通过与实验对比的方法予以证明. 尖劈装置及其装配如图 9 所示. 试件尺寸如图 10 所示, 试件厚度为 $t=97 \text{ mm}$. 材料的杨氏模量为 $E=12400 \text{ MPa}$, 泊松比 $\nu=0.3$. 取向元的空间分布如图 4 所示, 即 46 个取向构元. 取向构元和体积构元的初始刚度模量分别为

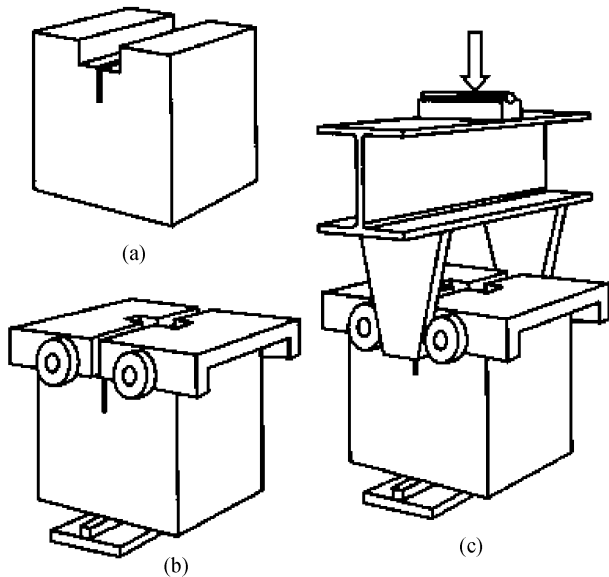


图 9 尖劈装置示意图^[34]

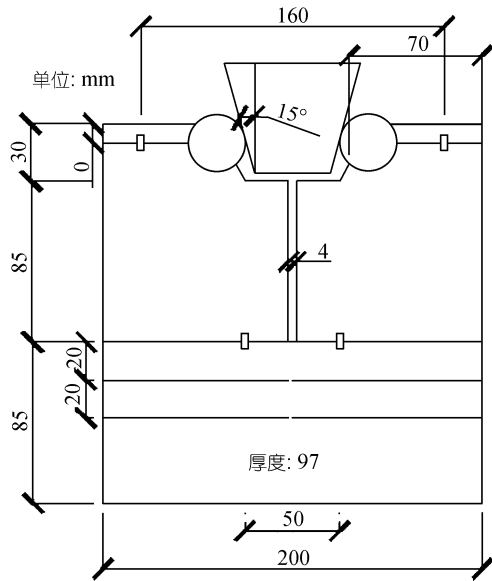


图 10 混凝土试件的几何构形图^[34]

$$\begin{cases} H = \frac{15}{2\pi} \mu \cdot \frac{2\pi}{46} = \frac{15E}{92(1+\nu)} \square 1555.2 \text{ MPa}, \\ K = \lambda - \mu = \frac{(4\nu-1)E}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \square 2384.6 \text{ MPa}. \end{cases} \quad (47)$$

小变形时, 体积构元刚度的变化可忽略不计. 混凝土材料的抗压强度远远大于抗拉强度, 因此, 可只考虑取向构元的拉伸损伤而认为压缩不导致损伤, 这对尖劈实验是合理的.

取向构元的本构曲线图(应力-应变曲线)由图 11 给出, 图中的两条折线分别表示取向构元本构取为双折线和三折线本构形式. 图 12 和 13 分别是取向构元本构曲线图 11 中的不同曲线时试件的载荷一位

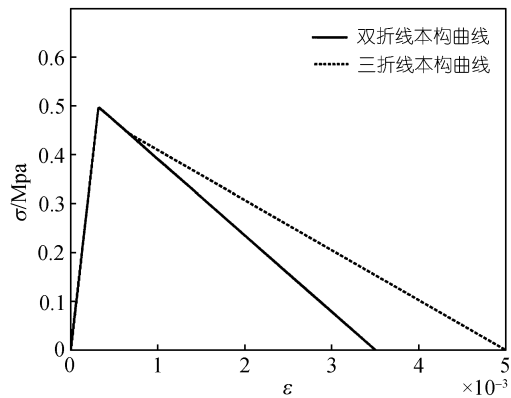


图 11 取向构元的本构曲线图

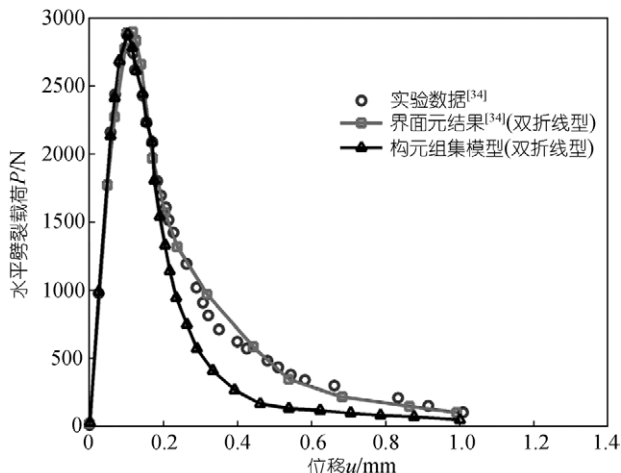


图 12 双折线本构时的计算与实验结果图

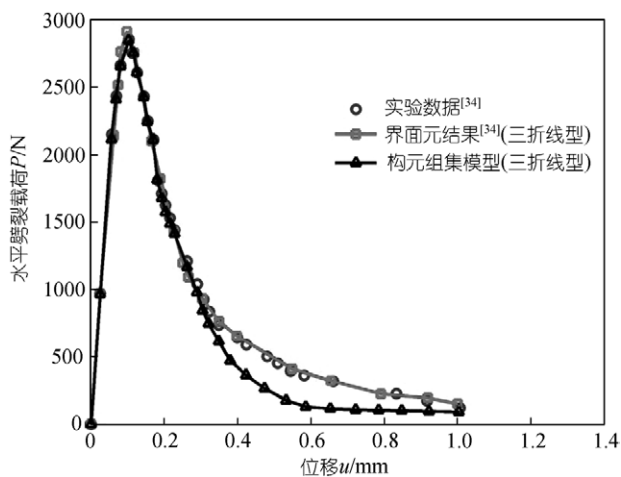


图 13 三折线本构时的计算与实验结果图

移曲线. 与实验结果(离散圆圈表示)比较, 三折线与实验结果符合更好, 若采用更复杂的本构形式可进一步拟合实验数据. 文献[34]还给出了基于“内聚区”模型的数值结果, 见图 12 和 13. 对比发现, 取向构元组集模型和“内聚区”模型都具有很好的精度, 都能很好预测峰值载荷. 过峰值载荷后, 构元组集模型的结

果下降快一些, 但差别不大.

5 结论

本文基于“对泛函势”理论提出了“取向构元组集”材料模型. 在求对势和的过程中建立了取向构元, 在求嵌入势和的过程中建立了另一种构元——体积构元. 材料的性质由这两种构元的性质所确定. 具体地, 材料的本构方程通过组集所有这两种构元的响应函数得到, 组集的方法是简单的纯几何方法. 经数学推导, 得到了广义 Hooke 定理的“取向构元组集”形式, 从而给广义 Hooke 定理赋予了新的物理解释, 二者完全等价.

基于损伤的本质是“原子间键合力不断改变和破坏”的基本认识, 材料损伤及其诱导的各向异性得以由取向构元的概念自然地表达. “取向构元组集”模型的弹性(脆性损伤)张量是典型的四阶张量, 并严格满足弹性主对称性, 同时, 它的应力和应变都不需要作特别的对称化处理. 本模型是一个典型的各向异性损伤模型, 和 Murakami 各向异性损伤模型^[3,4,9]一样, 它们的损伤效果张量都是四阶张量.

初步的数值实验证明了模型的有效性. 在塑性软化和损伤数值模拟过程中, 再现应变局部化并同时保持物理客观性^[38~41](局部化区域宽度有限, 耗散能有限等)等问题目前尚未得到很好解决. 当前主要采取的方法大致有非局部化方法^[42~44], 梯度理论^[33,42,44~48]和 Cosserat 模型等^[49,50], 采用这些模型虽然可以在一定程度上克服局部化所带来的数值困难(从数学上, 损伤的产生和演化导致控制方程型态改变, 如静力问题中椭圆型方程因损伤变为双曲型方程, 动力问题中的双曲型方程变为椭圆型方程), 同时它们也将带来一些新的问题(如需要新的边界条件), 这些新问题的物理解释在进一步发展中, 关于这方面的工作将作专门论述, 在此从略.

参考文献

- 1 赖祖涵. 金属的晶体缺陷与力学性质. 北京: 冶金工业出版社, 1988
- 2 楼志文. 损伤力学基础. 西安: 西安交通大学出版社, 1991
- 3 余寿文, 冯西桥. 损伤力学. 北京: 清华大学出版社, 1997
- 4 Krajcinovic D. Damage Mechanics. Amsterdam: Elsevier, 1996

- 5 Kachanov L M. On the time to failure under creep condition. *Izv Akad Nauk USSR Otd Tekhn Nauk*, 1958, 8: 26—31
- 6 Chaboche J L. Continuum damage mechanics: Part I general concepts, and Part II damage growth, crack initiation, and crack growth. *J Appl Mech*, 1988, 55: 59—72
- 7 Lemaitre J. Local approach of fracture. *Eng Fract Mech*, 1986, 25(5/6): 523—537
- 8 Lemaitre J. 损伤力学教程. 北京: 科学出版社, 1996
- 9 Lemaitre J, Desmorat R. *Engineering Damage Mechanics: Ductile, Creep, Fatigue and Brittle Failures*. Berlin: Springer, 2005
- 10 Kachanov L M. *Introduction to Continuum Damage Mechanics*. Dordrecht: Martinus Nijhof Publishers, 1986
- 11 Reusch F, Svendsen B, Klingbeil D. A non-local extension of Gurson-based ductile damage modeling. *Comput Mater Sci*, 2003, 26: 219—229
- 12 匡震邦. 非线性连续介质力学. 上海: 上海交通大学出版社, 2002
- 13 Feng Y C. *Foundations of Solid Mechanics*. New Jersey: Prentice Hall, 1965
- 14 Raabe D. *Computational Materials Science—The Simulation of Materials Microstructures and Properties*. Weinheim: WILEY-VCH, 1998
- 15 Raabe D, Roters F, Barlet F, et al. *Continuum Scale Simulation of Engineering Materials: Fundamentals-Microstructures-Process Applications*. Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co KGaA, 2004
- 16 Phillips R. *Crystals Defects and Microstructures-Modeling Across Scales*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001
- 17 Landau L D, Lifshits E M. *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*. Oxford: Pergamon Press, 1977
- 18 弗兰克, 施密特. 分子模拟: 从算法到应用. 北京: 化学工业出版社, 2002
- 19 Miller R, Ortiz M, Phillips R, et al. Quasicontinuum models of fracture and plasticity. *Eng Fract Mech*, 1998, 61: 427—444
- 20 Miller R, Tadmor E B, Phillips R, et al. Quasicontinuum simulation of fracture at the atomic scale. *Model Simul Mater Sci Eng*, 1998, 6: 607—638
- 21 Chen Y P, James D L, Eskandarian A. Atomistic viewpoint of the applicability of microcontinuum theories. *Int J Solid Struct*, 2004, 41: 2085—2097
- 22 Chen Y P, James D L. Connecting molecular dynamics to micromorphic theory (I, II). *Physica A*, 2003, 322: 359—392
- 23 Gao H J, Klein P J. *Mech Phys Solids*, 1998, 46(2): 187—218
- 24 Chandraseker K, Mukherjee S. Modifications to the Cauchy-Born rule. Applications in the deformation of single-walled carbon nanotubes. *Int J Solids Struct*, 2006, 43: 7128—7144
- 25 Ericksen J L. The Cauchy and Born hypotheses for crystals. In: Gurtin M E, ed. *Phase Transformations and Material Instabilities in Solids*. New York: Academic Press, 1984. 61—77
- 26 Guo X, Wang J B, Zhang H W. Mechanical properties of single-walled carbon nanotubes on higher order Cauchy-Born rule. *Int J Solids Struct*, 2006, 43: 1276—1290
- 27 Xiao S P, Yang W X. Temperature-related Cauchy-Born rule for multiscale modeling of crystalline solids. *Comput Mater Sci*, 2006, 37(3): 374—379
- 28 Ericksen J L. The Cauchy-Born hypothesis for crystals. In: Gurtin M, ed. *Phase Transformations and Material Instabilities in Solids*. New York: Academic Press, 1984. 50—66
- 29 Arroyo M, Belytschko T. An atomistic-based finite deformation membrane for single layer crystalline films. *J Mech Phys Solids*, 2002, 50: 1941—1977
- 30 Bažant Z P, Gambarova P G. Crack shear in concrete: Crack band microplane model. *J Struct Eng*, 1984, 110: 2015—2036
- 31 Bažant Z P, Pijaudier-Cabot G. Nonlocal damage, localization instability and convergence. *J Appl Mech*, 1988, 55: 287—293
- 32 Bažant Z P, Prat P. Microplane model for brittle plastic material, I. Theory and II. Verification. *J Eng Mech*, 1988, 114: 1672—1702
- 33 Kuhl E, Ramm E, Borst R D. An anisotropic gradient damage model for quasi-brittle materials. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 2000, 183: 87—103
- 34 Que N S, Tin-Loi F. Numerical evaluation of cohesive fracture parameters from a wedge splitting test. *Eng Fract Mech*, 2002, 69: 1269—1286
- 35 Planas J, Elices M. Nonlinear fracture of cohesive materials. *Int J Fract*, 1991, 51: 139—157
- 36 Bolzon G, Ghilotti D, Maier G. Parameter identification of the cohesive crack model. In: Sol H, Oomens C W J, eds. *Material Identification Using Mixed Numerical and Experimental Methods*. Dordredt: Kluwer, 1997. 213—222
- 37 Tin Loi F, Li H. Numerical simulations of quasibrittle fracture processes using the discrete cohesive crack model. *Int J Mech Sci*, 2000,

- 42: 367—379
- 38 Belytschko T, Organ D, Gerlach C. Element-free Galerkin methods for dynamic fracture in concrete. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 2000, 187: 385—399
- 39 Borst R D. Numerical aspects of cohesive-zone models. *Eng Fract Mech*, 2003, 70: 1743—1757
- 40 Needleman A. Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 1988, 67: 69—85
- 41 Wells G N, Sluys L J. Three-dimensional embedded discontinuity model for brittle fracture. *Int J Solids Struct*, 2001, 38: 897—913
- 42 Lasry D, Belytschko T. Localization limiters in transient problems. *Int J Solids Struct*, 1988, 24: 581—597
- 43 Peerlings R H J, Borst R D, Brekelmans W A M, et al. Localization issues in local and nonlocal continuum approaches to fracture. *Eur J Mech A-Solids*, 2002, 21: 175—189
- 44 Peerlings R H J, Geers M G D, Borst R D, et al. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *Int J Solids Struct*, 2001, 38: 7723—7746
- 45 Chang C S, Askes H, Sluys L J. Higher-order strain/higher-order stress gradient models derived from a discrete microstructure, with application to fracture. *Eng Fract Mech*, 2002, 69: 1907—1924
- 46 Chen J S, Zhang X W, Belytschko T. An implicit gradient model by a reproducing kernel strain regularization in strain localization problems. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 2004, 193: 2827—2844
- 47 Peerlings R H J, Borst R D, Brekelmans W A M, et al. Grading enhanced damage for quasi-brittle materials. *Int J Numer Methods Eng*, 1996, 39: 3391—3403
- 48 Simone A, Wells G N, Sluys L J. From continuous to discontinuous failure in a gradient-enhanced continuum damage model. *Comput Meth Appl Mech Eng*, 2003, 192: 4581—4607
- 49 Cosserat E, Cosserat F. *Theory Des Corps Deformables*. Paris: Herman et Fils, 1909
- 50 Eringen A C. *Microcontinuum Field Theories I: Foundations and Solids*. New York: Springer, 1999