第 40 卷 第 4 期 力 学 进 展 Vol. 40 No. 4
2010 年 7 月 25 日 ADVANCES IN MECHANICS July 25, 2010

近场动力学方法及其应用*

黄 丹 [1,2,†] 章 青 [1,2] 乔丕忠 [1,3] 沈 峰 [1,2]

[1] 河海大学水文水资源与水利工程科学国家重点实验室, 南京 210098

[2] 河海大学工程力学系, 南京 210098

[3] Department of Civil and Environmental Engineering, Washington State University, Pullman, WA, 99164-2910, USA

摘 要 近场动力学 (peridynamics, PD) 是一种新兴的基于非局部作用思想建立模型并通过求解空间积分方程描述物质力学行为的方法. 它兼有分子动力学方法和无网格方法的优点, 避免了基于连续性假设建模和求解空间微分方程的传统宏观方法在面临不连续问题时的奇异性, 又突破了经典分子动力学方法在计算尺度上的局限, 在宏/微观不连续力学问题分析中均表现出很高的求解精度和效率. 首先概述了 PD 方法的理论基础、建模思路和计算体系; 进而介绍了 PD 方法在不同尺度不连续力学问题中的应用, 包括均匀与非均匀材料和结构的大变形、损伤、断裂、冲击、穿透和失稳问题, 结晶相变动力学问题以及纳米材料和结构的破坏问题; 最后讨论了 PD 方法在理论、计算和应用等方面值得进一步研究的问题.

关键词 不连续问题, 数值模拟, 近场动力学, 非局部模型

1 引 言

固体材料和结构的破坏问题是力学研究的经典难题, 也是机械、土木、水利、化工以及航空航天等工程领域关注的重点. 随着断裂力学、损伤力学等学科的发展和计算机软硬件水平的提高, 研究者建立了各种不同的力学模型和数值方法, 试图模拟固体材料和结构渐进破坏的全过程, 但在微缺陷 (裂纹和孔洞) 的演化、宏观裂纹的萌生和扩展以及裂纹间的相互作用等方面一直存在着模型的科学性以及计算精度和效率等方面的困难.

传统的有限元法 (finite element method, FEM)、有限差分法 (finite difference method, FDM) 等宏观方法均基于连续介质力学理论框架建立物质模型, 在分析破坏问题时必须预先知道裂纹的存在与否及其位置和尺寸, 在裂纹扩展后又必须重新划分网格, 计算结果也会具有强烈的网格依赖性. 无网格方法消除了网格依赖性, 但其高阶连续的近似函数在求解裂纹扩展等不连续力学问题时并不具有优势, 且结点影响域的重叠及其是否跨越不连续界面的判断将影响计算效率. 为此, 研究者又提出了扩展有限元 (X-finite element method, XFEM) 和非连续有限元 (discontinuous finite element method, DFEM) 等思想, 在有限元形函数中引入能反映不连续现象的附加函数来描述不连续力学问题, 取得一定成果, 但在分析三维裂纹扩展和群裂纹等复杂破坏问题时同样面临挑战.

传统模型和数值方法在分析破坏问题时面临的精度和效率瓶颈, 源自于其理论基础 (连续介质力学体系) 与所描述的问题本身 (不连续) 之间的矛盾, 这一根本问题随着 PD 方法的提出而可望得到解决. PD 方法不再基于连续性假设建模和通过空间微分方程求解力学问题, 而是将固体离散为空间域内一系列包含所有物性信息的带质量的物质点 (material point), 基于非局部作用思想建模, 根据空间积分方程的求解描述物质点的运动, 不连续现象自然出现, 不会带来奇异性和计算效率问题. 另一方面, PD 方法采用统一的模型和

收稿日期: 2010-01-07, 修回日期: 2010-05-07

* 国家重点基础研究发展 “973” 计划 (2007CB714104)、国家自然科学基金 (10972072) 和河海大学中央高校基本科研业务费专项资金及水文水资源与水利工程科学国家重点实验室专项研究经费 (2009587012, 2009585912) 资助项目

† E-mail: danhuang@hhu.edu.cn

求解体系描述从原子尺度到宏观尺度的力学行为, 突破了经典分子动力学模型在求解尺度上的局限, 也避免了传统的多尺度模型在不同尺度力学量传递等方面的复杂性, 因而引起了相关领域的广泛关注, 并得到迅速发展. 近十年来, 研究者先后完成了 PD 方法的理论论证和方法体系的构建, 并将其成功应用于不同尺度材料和结构的静、动力破坏分析中. 但与此同时, PD 方法仍存在大量有待深入研究的问题.

本文概述 PD 方法的基本思想和研究进展, 分别介绍 PD 方法的理论基础、建模思路和计算体系, PD 与传统连续介质力学理论的联系, 以及 PD 方法在不同尺度不连续问题中的应用, 并对 PD 方法在理论、计算和应用等方面值得进一步研究的问题作出展望.

2 PD 方法的理论和计算体系

2.1 理论基础

2000 年, 美国 Sandia 国家实验室的 Silling 提出了 PD 方法的基本思想 [1]. 如图 1 所示, 若物体占据某一空间域 R, 假设在某一时刻 t, 域内任一物质点 $\boldsymbol{x}$ 与其周围空间一定范围 δ(peridynamic horizon, 近场范围尺寸) 内的任意其它物质点 $\boldsymbol{x}' \in R : \|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}\| \leq \delta$ 之间存在相互作用力 $\boldsymbol{f}$

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}', t), t) \tag{1}$$

则根据牛顿第二定律可得 PD 方法的基本方程

$$\rho(\boldsymbol{x})\ddot{\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{x}, t) = \int_H \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}', t), t)\mathrm{d}V' + \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}, t) \tag{2}$$

其中, ρ 为物质密度, $\boldsymbol{u}$ 为物质点的位移, $\boldsymbol{b}$ 代表单位体积物质所受的外载荷, 即外载荷密度. H 为空间域内物质点 $\boldsymbol{x}$ 的 "近场范围"

$$H = H(\boldsymbol{x}, \delta) := \{\boldsymbol{x}' \in R : \|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}\| \leq \delta\}$$

由式 (2) 可知, 在 PD 模型中, 物质点间的相互作用力函数 (constitutive function, 称为 "本构力函数")$\boldsymbol{f}$ 包含了材料的物性信息 (即传统理论中的本构信息), 它不再以传统的应力 - 应变关系等形式出现, 也不假设位移场的连续性, 求解时不存在空间求导. 从另一方面来说, 位移场的连续与否并不影响基本方程的求解, 不连续性 (如裂纹、界面) 在求解运动方程时自然产生, 因而不会出现传统连续性模型求解时出现的病态特征.

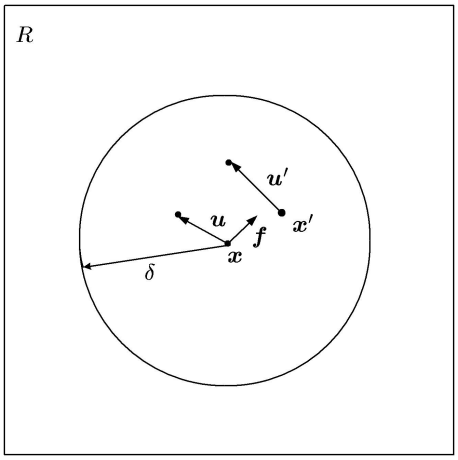

图 1 物质点间的相互作用力

从 PD 方法的基本方程可见, 基于空间积分方程求解的 PD 模型是一个典型的计入远程作用的新型非局部模型, 可以对基于偏微分方程求解的传统连续介质力学模型和传统非局部模型进行有益补充.

2.2 模型的建立

由基本方程 (2) 可知, 构建 PD 模型的关键在于本构力函数 $\boldsymbol{f}$ 的确定, 类似于分子动力学 (MD) 模型中势函数的确定. 假设物质系统构型在作刚体运动时保持不变, 且物质点间的作用力本身与时间无关, 则函数 $\boldsymbol{f}$ 可简化为

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t), \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}', t), t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}') - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}' - \boldsymbol{u}) \tag{3}$$

在空间域 R 内 $\boldsymbol{x}$ 点处由于近场范围内物质点间相互作用而引起的内部作用力为

$$\boldsymbol{L}_u(\boldsymbol{x}) = \int_H \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}' - \boldsymbol{u})\mathrm{d}V' \tag{4}$$

则基本方程 (2) 可以简化为

$$\rho\ddot{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{L}_u + \boldsymbol{b} \tag{5}$$

相应的静力平衡方程为

$$\boldsymbol{L}_u + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{6}$$

对于均匀材料, 近场范围内两物质点间的相互作用力可进一步简化为与两物质点在参考构形

中的相对位置 $\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}$ 和相对位移 $\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{u}'-\boldsymbol{u}$ 相关的函数

$$\boldsymbol{f}=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}'-\boldsymbol{u},\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x})=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}) \tag{7}$$

根据牛顿第三定律 (作用与反作用定律) 可知

$$\boldsymbol{f}(-\boldsymbol{\eta},-\boldsymbol{\xi})=-\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}) \tag{8}$$

在考虑长程作用力的近场范围内, 两物质点间的相互作用力 $\boldsymbol{f}$ 应该与二者在现时构形中的相对位置矢量 $\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\xi}=(\boldsymbol{x}'+\boldsymbol{u}')-(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{u})$ 方向一致, 即

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\times(\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{0} \tag{9}$$

由此可写出均匀材料的本构力函数 $\boldsymbol{f}$ 一般式

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})(\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\xi}) \tag{10}$$

其中 $F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$ 为标量函数, 且满足

$$F(-\boldsymbol{\eta},-\boldsymbol{\xi})=F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$$

对各向同性材料, $F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$ 仅仅与 $|\boldsymbol{\eta}|$, $|\boldsymbol{\xi}|$ 以及 $\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi}$ 之间的夹角有关, 可将其描述为

$$F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=G(p,q,r) \tag{11}$$

其中 $p=|\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\eta}|$, $q=\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\eta}$, $r=|\boldsymbol{\xi}|$

若在空间近场范围内材料中的物质点 $\boldsymbol{x}'$ 的运动轨迹经过任意一个闭合回路 $\varGamma$ 后, 对物质点 $\boldsymbol{x}$ 所做的功为零, 即

$$\oint_{\varGamma}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}=0,\forall\varGamma \tag{12}$$

则该材料可以用微观弹性 PD 模型来描述, 此时必然存在一个标量函数 $w(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$, 使得

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=\frac{\partial w(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})}{\partial\boldsymbol{\eta}} \tag{13}$$

此处的 $w(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$ 类似于分子动力学方法中的对势函数, 描述近场范围内两物质点间相互作用的强弱. 由此可将微观弹性材料的 PD 本构力描述函数 $F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$ 简化为 [1]

$$F(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=H(p,\boldsymbol{\xi}) \tag{14}$$

将本构力函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$ 线性化, 可得

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})+\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})\cdot\boldsymbol{\eta}+o(|\boldsymbol{\eta}|^2) \tag{15}$$

式中 $\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})$ 为 PD 本构模型中的微观弹性系数张量. 对于线弹性材料, 它是一个二阶对称张量

$$\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\xi})=\frac{\partial\boldsymbol{f}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})}{\partial\boldsymbol{\eta}}=\frac{\partial^2 w(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})}{\partial\boldsymbol{\eta}^2} \tag{16}$$

相应地

$$w(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})\cdot\boldsymbol{\eta}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})\cdot\boldsymbol{\eta} \tag{17}$$

由式 (10), (12) 和 (16) 可知, 对于线弹性材料

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})=\boldsymbol{\xi}\otimes\frac{\partial F(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})}{\partial\boldsymbol{\eta}}+F(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})\cdot\boldsymbol{I}=\\ \lambda(\boldsymbol{\xi})\boldsymbol{\xi}\otimes\boldsymbol{\xi}+F_0(\boldsymbol{\xi})\cdot\boldsymbol{I}\end{aligned} \tag{18}$$

式中 $\lambda(\boldsymbol{\xi})$ 和 $F_0(\boldsymbol{\xi})$ 为标量函数, $\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵.

$$\lambda(\boldsymbol{\xi})=\frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|^2}\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial F(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi})}{\partial\boldsymbol{\eta}}F_0(\boldsymbol{\xi})=F(\boldsymbol{0},\boldsymbol{\xi}) \tag{19}$$

且有

$$\lambda(-\boldsymbol{\xi})=\lambda(\boldsymbol{\xi}),\quad F_0(-\boldsymbol{\xi})=F_0(\boldsymbol{\xi}) \tag{20}$$

结合式 (11), (14) 和实验结果, 可分别构建各向同性材料和微弹性材料的本构力函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})$, 如 Kilic[2,3] 最近基于这一思路建立的典型微弹性材料的 PD 本构力函数

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})=\frac{\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\xi}}{|\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\xi}|}\mu(\boldsymbol{\xi},t)\frac{9K}{\pi\delta^4}\exp\left[-(|\boldsymbol{\xi}|/\delta)^2\right](s-\alpha\theta) \tag{21}$$

该式中包含了传统热力学弹性材料的本构信息, 其中 K 为体积模量, α 为热膨胀系数, θ 为物质点对的平均温度, δ 为考虑相互作用力的近场范围尺寸, s 描述相互作用的两个物质点间相对位移的程度 (或物质点对的伸长率)

$$s=\frac{|\boldsymbol{\eta}+\boldsymbol{\xi}|-|\boldsymbol{\xi}|}{|\boldsymbol{\xi}|} \tag{22}$$

$\mu(\boldsymbol{\xi},t)$ 表征物质点对的破坏情况

$$\mu(\boldsymbol{\xi},t)=\begin{cases}1 & s(t',\boldsymbol{\xi})-\alpha\theta<s_0,0<t'<t\\ 0 & \text{其它}\end{cases} \tag{23}$$

其中 s_0 为物质点对的临界伸长率 (critical stretch), 表示在一个物质点对内, 相互作用的两个物质点间经过一定的相对位移后, 当点对的伸长率超过 s_0 时, 该点对破坏, 两物质点间不再相互作用. 根据这一点对破坏的判别标准, Silling[4,5] 和 Kilic[2,3] 等将材料中 $\boldsymbol{x}$ 点处的损伤定义为

$$\varphi(\boldsymbol{x},t)=1-\frac{\int_H\mu(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi},t)\mathrm{d}V_{\boldsymbol{\xi}}}{\int_H\mathrm{d}V_{\boldsymbol{\xi}}} \tag{24}$$

或

$$\varphi(\boldsymbol{x},t)=1-\frac{\int_H \mu(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\xi},t)\exp\left[-(|\boldsymbol{\xi}|/\delta)^2\right]\mathrm{d}V_{\boldsymbol{\xi}}}{\int_H \exp\left[-(|\boldsymbol{\xi}|/\delta)^2\right]\mathrm{d}V_{\boldsymbol{\xi}}} \tag{25}$$

式 (25) 相对式 (24) 来讲, 增加考虑了近场范围尺寸 δ 对分析结果的影响.

由式 (21)~(25) 可见, PD 模型的本构力函数中包含了损伤和断裂描述, 不需要另外的断裂准则如传统的临界应力强度因子等, 因而在分析破坏问题时不再需要传统的开裂判断或裂纹路径等分析, 裂纹将自然萌生并扩展.

除了 Kilic 最近提出的如式 (21) 描述的 PD 本构力函数以外, Silling[1,4,5], Weckner[6,7] 和 Askari[8] 等在 PD 本构力函数的构建、弹性系数张量 $\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})$ 的表达式和求解方法, 均匀、各向同性、弹性以及谐和性、稳定性等 PD 本构模型的相关方面开展了一系列工作, 详细的推导过程和相关实例可见有关文献 [1,6~9].

从能量角度, 对微观弹性材料的 PD 模型, 在物质点 x 处的宏观弹性能密度可定义为

$$W_u(x)=\frac{1}{2}\int_H w(\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\xi})\mathrm{d}V'=\frac{1}{2}\int_H \frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{C}(\boldsymbol{\xi})\cdot\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}V' \tag{26}$$

相应地, 系统的宏观弹性能为

$$\Phi_u=\int_R W_u(\boldsymbol{x})\mathrm{d}V \tag{27}$$

结合式 (5),(8) 和 (13) 可得

$$\dot{\Phi}_u+\dot{T}_u=\int_R \boldsymbol{b}\dot{\boldsymbol{u}}\mathrm{d}V \tag{28}$$

表明外力做功等于弹性能和动能之和. 其中

$$\dot{T}_u=\int_R \rho\ddot{\boldsymbol{u}}\cdot\dot{\boldsymbol{u}}\mathrm{d}V=\int_R\left[\frac{\partial}{\partial t}(\frac{1}{2}\rho\dot{\boldsymbol{u}}\cdot\dot{\boldsymbol{u}})\right]\mathrm{d}V \tag{29}$$

基于 PD 理论框架, 将材料离散为大量物质点 (粒子), 每个物质点与其周围一定范围内其它物质点之间存在相互作用力 $\boldsymbol{f}$, 每两个物质点之间形成一个物质点对 (pairwise bond). 在线性微弹性材料的 PD 模型中, 点对的作用就像一根弹簧, 如图 2(a) 所示. 对于传统的理想弹塑性、脆弹性等材料行为, 点对的作用可简化为如图 2(b) 和 2(c) 所示. 除了微弹性材料的 PD 模型, Silling[1,9,10], Weckner[11] 和 Xu[12] 等还分析了关于黏性、损伤和断裂等行为在本构力函数中的表述, 并建立了与传统连续介质力学理论中的宏观物性参数有关的简化的 PD 本构力函数表达式.

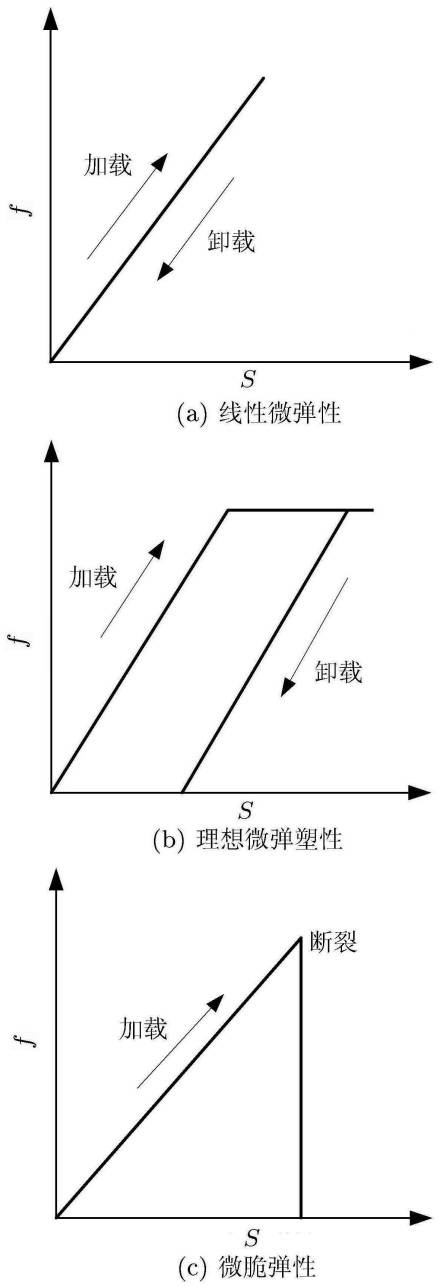

图 2 简化的 PD 本构模型

2.3 与传统连续介质力学理论的联系

为了将 PD 理论与基于局部作用的传统连续介质力学理论联系起来, 也为了方便 PD 理论的应用, Silling[1,5], Zimmermann[13], Weckner[6,7] 和 Lehoucq[14] 等将传统的力学量引入到 PD 理论中来, 并结合实例对已知传统力学性能参数的材料如何用 PD 模型参数来等价描述进行了推导、分析和验证.

由于 PD 理论中对材料物性的描述并没有涉及传统的应力 - 应变关系, Silling 在研究 PD 基本理论时, 提出了与传统的应力概念类似的 PD"面力密度" 概念 [1]. 假设过 $\boldsymbol{x}$ 点、法向为 $\boldsymbol{n}$ 的平面 Π 将材料所占据的空间 R 分成 R^+ 和 R^- 两个子空间, 其中

$$\begin{aligned} R^+ &= \{\boldsymbol{x}' \in R : (\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{n} \geq 0\} \\ R^- &= \{\boldsymbol{x}' \in R : (\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{n} \leq 0\} \end{aligned} \tag{30}$$

则将材料内任一点 $\boldsymbol{x}$ 处沿 $\boldsymbol{n}$ 方向的面力密度 $\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n})$ 定义为

$$\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) = \int_{\ell} \int_{R^+} f(\boldsymbol{u}' - \hat{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{x}' - \hat{\boldsymbol{x}}) \mathrm{d}V_{\boldsymbol{x}'} \mathrm{d}\hat{l} \tag{31}$$

式中 $\hat{l}$ 定义为

$$\hat{l} = \left\{\hat{\boldsymbol{x}} \in R^- : \hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} - s\boldsymbol{n}, 0 \leq s < \infty\right\} \tag{32}$$

由此, 对材料中的任一点, 可建立与传统理论中的 Piola–Kirchhoff 应力张量等价的描述

$$\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \tag{33}$$

除了应力张量外, Silling 在文献 [1] 中还给出了传统理论中的应力不变量在 PD 理论中的表述. 在此基础上, Weckner 等 [6]2005 年推导了一维固体材料在非均匀变形情况下的应力张量表述. 2008 年, Lehoucq[14] 建立了更接近传统理论的 PD 应力张量的一般描述, 在三维笛卡尔坐标系 $oxyz$ 中, 物质点 $\boldsymbol{x}$ 处的 PD 应力状态可定义为

$$\begin{aligned} \nu(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (y+z)^2 \cdot \\ \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x} + y\boldsymbol{m}, \boldsymbol{x} - z\boldsymbol{m}) \otimes \boldsymbol{m} \mathrm{d}z \mathrm{d}y \mathrm{d}\Omega_m \end{aligned} \tag{34}$$

式中, $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x})$ 与上文意义相同, 表示近场范围内物质点间的作用力, Ω 为单位球面, $\boldsymbol{m}$ 为过 $\boldsymbol{x}$ 点的任意单位矢量. 该点的应力分量可表示为

$$\begin{aligned} \nu_{ij}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (y+z)^2 \cdot \\ f_i(\boldsymbol{x} + y\boldsymbol{m}, \boldsymbol{x} - z\boldsymbol{m}) m_j \mathrm{d}z \mathrm{d}y \mathrm{d}\Omega_m \end{aligned} \tag{35}$$

通过进一步推导可得

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{x}) = \int_R \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \mathrm{d}V_{x'} \tag{36}$$

或

$$\begin{aligned} \frac{\partial \nu_{ij}(\boldsymbol{x})}{\partial x_j} = \int_{\Omega} \int_0^{\infty} y^2 f_i(\boldsymbol{x} + y\boldsymbol{m}, \boldsymbol{x}) \cdot \\ \mathrm{d}y \mathrm{d}\Omega_m = \int_R f_i(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \mathrm{d}V_{x'} \end{aligned} \tag{37}$$

由式 (36), 运动方程 (5) 可以描述为

$$\begin{aligned} \rho \ddot{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{L}_u + \boldsymbol{b} = \int_R \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}) \mathrm{d}V_{\boldsymbol{x}'} + \\ \boldsymbol{b} = \nabla \cdot \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{b} \end{aligned} \tag{38}$$

上式与传统连续介质力学理论中的运动 (平衡) 方程完全一致. 由此可见, $\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{x})$ 与传统理论中的 Piola–Kirchhoff 应力张量 $\boldsymbol{\sigma}$ 等效, 且有

$$\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{n}) \tag{39}$$

Lehoucq 等人在 2008 年发表的论文 [14] 中还给出了关于 PD 边界应力的定义、PD 应力以及面力密度的力学解释, 并具体推导了半无限空间中均匀固体材料内的 PD 应力分量. 但值得注意的是, 由于在 PD 理论中没有引入连续性假设, 因而不能像在传统理论中那样, 直接通过形变梯度的概念将 Piola–Kirchhoff 应力转换成 Cauchy 应力. 此外, 式 (34) 中关于 PD 应力张量的定义方法与 Irving[15] 和 Noll[16] 等人基于统计力学方法对运动流体中应力的描述方法是一致的, 只是后者基于连续性假设可以直接得到 Cauchy 应力.

2009 年, Weckner 等在向 Sandia 国家实验室提交的一篇研究报告 [17] 中, 基于 Laplace 变换和 Fourier 变换, 给出了空间 PD 运动方程解的积分形式, 通过严格的数学推导以及数值求解, 比较了均匀各向同性线弹性材料在相同载荷作用下的传统解和 PD 解, 并结合静、动态实例说明了二者之间的差异. 他们的研究表明, 在进行瞬态分析时, Dirac 分布 (δ 函数) 形式的载荷会在 PD 解中也带来 Dirac 函数, 而传统解中则没有. 此外, 不考虑 Dirac 函数时, PD 解比传统解显得更光滑, 如在一维单点载荷问题中传统解的应变场在载荷作用点处不连续, 而 PD 解依然保持连续. 在三维单点载荷问题分析中发现, 传统解存在 $1/x$ 形式的奇异性, 而在考虑任意有限的近场范围时, PD 解的位移值均为有限值, 消除了传统解中的奇异性. 这与 Silling[5] 和 Kilic[2,3,18,19] 等在裂纹扩展模拟中的结论一致, 当选取任意有限的近场范围尺寸时, 裂纹尖端不存在应力奇异性, 而当近场范围尺寸趋于零时, PD 解与传统解一致. 从这个角度来讲, 可以认为考虑局部作用的传统连续介质力学理论相当于考虑非局部作用的 PD 理论的一个特例.

2.4 数值计算体系

PD 方法根据所考虑的近场范围内物质点间的相互作用建立运动方程, 通过积分方程的求解描述物质点的运动, 计算体系与分子动力学方法类似, 可以视为一种宏观尺度的分子动力学方法; 在离散过程中不需要进行网格划分, 天然具有无网格法的优点; 再加上其本构力函数中自然包含损伤和断裂描述, 因而避免了传统破坏分析中的不连续性判断和网格二次划分等问题.

在 Silling 研究组提出 PD 理论框架的同时, Sandia 国家实验室的相关研究人员初步开发了应用 PD 方法模拟材料和结构破坏的程序 [1,9,10], 并经过在不同尺度不连续力学问题中的应用和修改完善 [2~8,11~13,18,19], 逐渐形成完整的 PD 数值离散和计算体系 [20~24].

按照 PD 思想对均匀固体进行空间离散 (例如在宏观尺度模拟中按空间笛卡尔坐标系均匀离散, 结点间距 $|\Delta\boldsymbol{x}|$), 对结点 $\boldsymbol{x}_i$, 考虑其近场范围内 ($|\boldsymbol{x}_p-\boldsymbol{x}_i|<\delta$) 的相互作用, 可将运动方程 (5) 离散为

$$\rho\ddot{\boldsymbol{u}}_i^n=\sum_p \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}_p^n-\boldsymbol{u}_i^n,\boldsymbol{x}_p-\boldsymbol{x}_i)V_p+\boldsymbol{b}_i^n \tag{40}$$

式中 n 为时间步号; V_p 为结点 p 处的体积, 在上述空间均匀离散情形下, $V_p=|\Delta\boldsymbol{x}|^3$; $\boldsymbol{u}_i^n=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_i,t^n)$.

结合式 (15), 可得式 (40) 的线性化形式

$$\rho\ddot{\boldsymbol{u}}_i^n=\sum_p \boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}_p-\boldsymbol{x}_i)(\boldsymbol{u}_p^n-\boldsymbol{u}_i^n)V_p+\boldsymbol{b}_i^n \tag{41}$$

对线弹性材料, 弹性系数矩阵 $\boldsymbol{C}$ 由式 (18) 给出. Silling 研究组对式 (41) 的线性离散进行了标准误差分析 [4,5,21], 并结合稳定性分析 [25] 提出了稳定的迭代时间步长要求

$$\Delta t<\sqrt{\frac{2\rho}{\sum\limits_p V_p\,|\boldsymbol{C}(\boldsymbol{x}_p-\boldsymbol{x}_i)|}} \tag{42}$$

近场范围尺寸 δ 的选取与材料的物理本质有关, 在微尺度的模拟 [4,26~30] 中, δ 的选取常与原子或分子间距有关; 而在宏观破坏模拟中, δ 的选取可视具体情况而定, 在现有模拟中一般取 $\delta=3|\Delta\boldsymbol{x}|$, 本构参数矩阵 $\boldsymbol{C}$ 中的系数并不受近场范围尺寸大小的影响. 最近, 在不断完善 PD 数值方法体系的基础上, Silling[5,21], Emmrich[30] 和 Bobaru[20,31] 等分析了 PD 计算中的收敛性问题、自适应结点加密问题以及尺寸效应问题, 并结合具体实例与传统数值方法进行了比较. 他们的研究显示, 在 PD 模拟中进行局部自适应结点加密可以显著降低数值解的相对误差, 因而特别适用于局部应力/应变集中的情况, 如裂纹尖端区域的模拟.

在 PD 模型中, 通过设置边界几层结点的外力项和位移项, 可以实现传统的应力边界与位移边界条件, 具体的推导过程和典型实例可参考文献 [1,4,5,24]. 对于宏观接触问题和微观的粒子运动问题, 可在本构力函数中增加考虑物质点或粒子间的短程排斥力作用 [32], 类似于分子动力学模拟中势函数里的排斥项.

2.5 基于状态的 PD 模型

PD 模型和方法因其在描述固体的破坏等不连续力学问题方面的独特优势吸引了相关领域的高度关注, 经过不断地发展完善, 形成了自身的方法体系, 并分别在宏/细/微观静、动力破坏分析中得到成功应用. 但与此同时, PD 方法也显示出一定的局限性 [33], 主要体现在以下两个方面: 一是和传统理论的结合不够紧密, 例如传统理论中的应力、应变、弹性常数以及其它物性参数在 PD 模型中没有明确的描述和使用, 这反过来影响了对已知传统物性参数 (如弹性模量 E、剪切模量 G 等) 的材料进行 PD 建模, 以及将数值分析结果与传统实验和数值结果进行对比. 前文提到的 Lehoucq[14] 和 Weckner[17] 等最新的工作就集中于此方面. 另一方面, 上述的 PD 方法中描述材料物性信息的本构力函数 $\boldsymbol{f}$ 完全基于单一物质点对中物质点间的相互作用, 而没有考虑物质点自身所处的环境的影响以及物质点对之间的相互作用, 这种过于简化的本构模型类似于分子动力学模拟中的中心对势 [34], 导致 PD 模型的应用范围有限. 例如在均匀各向同性线性微弹性 PD 材料的本构建模研究中发现, 基于上述思路建立的不同的 PD 材料模型其泊松比均为 1/4, 并且只能是 1/4[1,8,11], 很多传统的弹性材料无法准确建立相应的 PD 模型. 此外, 对传统的材料特性如金属的塑性、粘性特征, 最初的 PD 模型无法正确反映, 如在无剪切变形的静水应力状态下, PD 模型也会产生永久变形, 这显然与实际情况不符合. 虽然可以在式 (3) 的本构力函数 $\boldsymbol{f}$ 中添加各种修正项以提高精度, 但该问题没有得到彻底解决.

为了突破传统 PD 模型的局限, Silling 于 2007 年提出了基于物质点状态的 PD 理论 (peridynamics state theory)[33]. 类似于分子动力学模型中描述原子间作用的镶嵌原子势 (embedded atom method, EAM) 对传统中心对势的修正, 该方法在传统 PD 本构模型的基础上增加考虑物质点所处的状态以及物质点对之间的相互影响, 因而大幅提高了 PD 方法的计算精度以及 PD 本构建模的普适性.

在基于状态的 PD 模型 (或称 "PD 状态模型") 中, Silling 等引入物质点所处的 "变形状态" 和相应的 "力状态" 概念, 用二者之间的关系来描述 PD 模型的物性信息. 在 2009 年的研究报告中, Warren[35] 和 Silling[36] 等建立了线弹性、弹塑性固体以及线性流体的 PD 状态模型, 推导了传统物性参数与 PD 状态模型本构参数的联系, 并对基于状态的 PD 本构力函数进行了线性化和数学论证, 还进一步提出了与传统理论相似的以二阶应力 - 应变张量形式描述的 PD 状态模型 "本构关系". 研究显示, PD 状态模型继承了传统 PD 模型的优点, 例如可以自然描述不连续现象 (如损伤演化、裂纹萌生与扩展), 而又突破了传统 PD 模型的局限性, 如: 可以适用于泊松比不等于 1/4 的其它材料 (包括固体和流体); 断裂的出现不仅仅与单一的点对有关, 而与近场范围内的所有点对有关; 在模拟弹塑性问题时也不再有上文提到的传统 PD 模型的缺陷. 但是, 基于状态的 PD 模型还处于理论框架完善和数值计算体系构建阶段, 因而目前有关这一修正的 PD 方法的应用研究报道尚比较少见.

3 PD 方法的应用

PD 研究一方面集中于理论模型和计算体系的不断发展和完善, 另一方面则关注于将 PD 方法应用到不同类型的不连续力学问题分析, 包括宏观尺度的大变形、静/动力破坏、失稳、穿透问题和细微观尺度的相变动力学与破坏问题等, 并试图将 PD 模型与其它模型 (如有限元分析 (FEA) 模型和分子动力学 (MD) 模型等) 联系起来.

3.1 宏观不连续问题分析

目前的 PD 应用研究大多侧重于宏观尺度的大变形、裂纹扩展、接触、失稳和冲击等破坏问题分析. 在 PD 方法面世之初, Silling[1] 就对反平面剪切裂纹问题进行了 PD 建模和分析并与传统解进行了比较, 证明 PD 解不存在裂尖应力奇异性, 且不需要引入断裂准则. 随后, Silling[37] 建立了一维均匀材料的 PD 模型, 并进行了各种载荷作用下的变形和破坏分析; 在此基础上, Weckner 分别进行了均匀和非均匀杆的动力学分析 [6,7] 并将分析结果与传统结果进行了比较; Kilic 模拟了混凝土柱的失稳问题 [2,3], 分析了截面尺寸和边界条件对失稳临界载荷的影响, 并推广到板的失稳模拟. 这些研究分别从不同角度验证了 PD 模型和方法在静动力变形、失稳和破坏方面的分析精度与效率.

多晶断裂一直是材料学与力学界研究的重点, 对多晶脆性断裂 (如多晶硅、陶瓷) 问题, 在已有的传统数值研究 [38,39] 中裂纹往往沿晶界扩展, 这与实验结果 [40] 并不完全符合. Askari[41] 等构建了与晶粒方向及晶粒内部粒子点对方向同时相关的 PD 微弹性本构模型来模拟宏观多晶硅的破坏过程, 结果表明除了沿晶界的裂纹扩展外, 还存在晶粒内部的断裂 (如图 3), 这比传统数值结果更接近实验现象, 且能反映宏观破坏过程中的微观机制.

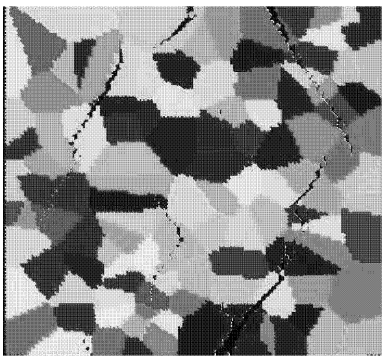

图 3 多晶脆性断裂的近场动力学 (PD) 模拟 (包括晶界断裂和穿晶断裂)[41]

Kilic[19] 最近分析了含初始裂纹的淬火玻璃在不同初始缺陷条件下的裂纹扩展路径及其受温度的影响, 模拟结果中出现了与试验结果 [40] 吻合的裂纹偏转、分叉及连接 (如图 4). 三维多晶金属断裂的细微观结构演化同样是当前数值模拟的难点, Weckner 等人 [11] 研究了金属结构中的三维多裂纹扩展问题, 结果表明: 在 PD 模拟过程中裂纹自然扩展, 且 PD 模拟能准确反映宏观材料渐进破坏过程中的细微观结构变化过程.

作为目前使用最广泛的建筑材料, 混凝土的破坏特性一直倍受关注. 但采用基于连续性假设的传统方法难以高效地描述混凝土破坏过程中的微结构变化, 且在模拟三维破坏问题时也存在计

算效率和精度方面的问题. Gerstle 等 [42~44] 构建了普通混凝土、钢筋混凝土材料和结构的 PD 模型并进行了拉伸、压缩、剪切以及组合加载工况下的破坏模拟, 数值结果能清楚地反映混凝土结构破坏过程中材料的微结构变化, 以及混凝土基体与加强筋之间的相对位移. Demmie 和 Silling[45] 应用 PD 方法进行了大型混凝土结构的极限载荷分析及其在冲击、爆炸作用下的损伤破坏过程等模拟, 为大型工程结构动力灾变破坏的数值模拟提供了新选择.

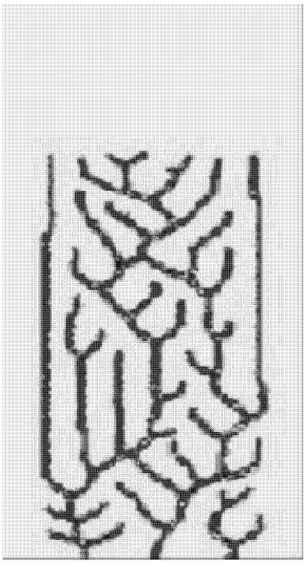

图 4 淬火玻璃破坏过程中初始裂纹的偏转、分叉和连接 (PD 模拟)[19]

随着复合材料的应用日益广泛, 对复合材料力学性能和破坏机制的研究也成为新的热点. Askari[8], Silling[10] 和 Kilic[18] 等进行了纤维增强复合材料的破坏分析. 在构建复合材料的 PD 模型时, 通过在本构力函数中引入方向参数以定义基体和纤维的不同属性来实现各向异性的描述. Kilic 的研究 [18] 中还分析了纤维方向、纤维分布以及层叠顺序等因素对纤维增强层合材料破坏模式的影响. Xu[12] 应用 PD 方法模拟了纤维增强复合板在双向加载条件下的损伤与破坏过程, 并分析了板材厚度对失效模式的影响, 数值模拟结果与实验结果一致, 且由于计算速度和精度不受不连续问题的影响, 进一步体现出 PD 方法在模拟复杂破坏问题时的优势. 基于复合材料的破坏模拟, Silling[9,46] 和 Kilic[2] 等还研究了非均匀材料 PD 建模的均匀化方法以及非均匀材料损伤累积的 PD 分析.

大变形和动力破坏问题是传统数值研究的难点, 但在 PD 模型中, 传统的 “破坏” 概念仅在本构力函数中进行定义, 裂纹自然产生和扩展, “变形” 也不再区分大变形和小变形, 因而降低了问题的复杂程度. Silling[47] 在构建了橡皮薄膜的 PD 模型后, 分别研究了含缺陷橡皮薄膜的拉伸破坏、气球的爆炸、薄膜的撕裂 (如图 5) 等问题, 显示了应用 PD 方法模拟强非线性问题的可行性.

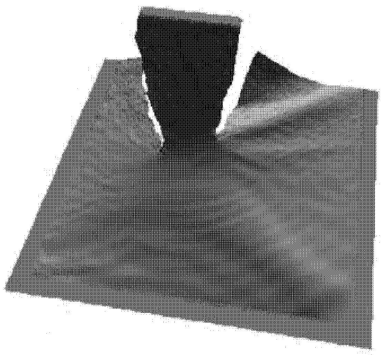

图 5 柔性薄膜撕裂的 PD 模拟 [47]

此外, PD 方法在冲击、穿透等问题中也得到成功应用, Silling 研究组 [4,5,21,48] 先后模拟了子弹穿透、刚性体冲击脆性板、混凝土小球碰撞刚性板 (如图 6) 等问题.

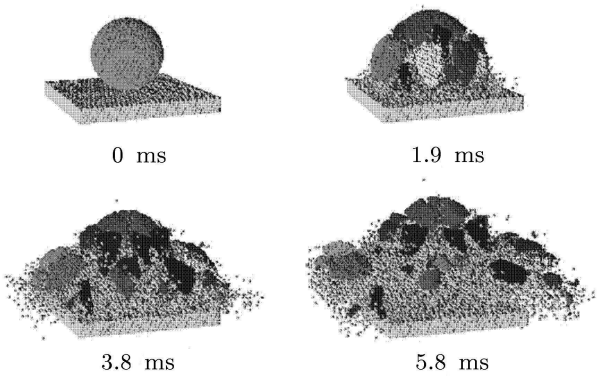

图 6 混凝土小球碰撞刚性板的 PD 模拟 [5,48]

3.2 细微观不连续问题分析

基于连续性假设的传统宏观方法 (如 FEM 和 FDM 等) 难以准确描述细微尺度下材料的力学特性或宏观力学行为的细微观机制, 更难以适用于微观尺度下由离散粒子 (如原子) 构成的材料. 与之相比, 从粒子间作用出发的 PD 方法则在细微观尺度的力学模拟中显示出和其它粒子动力学方法类似的适应性, 而又突破了传统粒子动力学方法 (如分子动力学等) 的应用范围.

2006 年, 加州理工学院的 Dayal 等人 [49] 将 PD 方法应用于晶体相变动力学分析中, 发现在 PD 模拟过程中相边界自然地形成和扩展, 无需额外的形核准则或运动方程 [50]. 基于 PD 研究, 他们提出一种新的从动力学失稳角度描述的晶粒形核与长大机制, 对传统的能量解释和热力学驱动解释是一个有益的补充. 通过 PD 研究还发现, 缺陷尺寸不仅与不稳定相的尺寸有关, 还与不稳定应变和周围应变之差有关. 此外, 与其它需要求解高阶微分方程的分析方法 (如相场理论或应变梯度理论) 相比, PD 方法的计算更简单, 是相变分析中一个新的极具吸引力的方法. 最近, Kilic[51] 研究组将 PD 方法应用到微电子元件封装领域, 建立了多层板的细观界面 PD 模型, 并分析了界面初始裂纹扩展和温度作用下微电子元件的损伤过程, 再次验证了 PD 在模拟细观不连续力学问题方面的精度.

PD 方法在原子尺度的力学模拟中也得到初步应用. Bobaru[26,28,29,41], Silling[27] 和 Lehoucq[52] 等应用 PD 方法对纳米晶体、纳米纤维网、碳纳米管以及纳米复合材料的力学特性和变形破坏进行了数值模拟和分析. Silling[47] 对纳米柔性纤维自组织变形的 PD 模拟 (如图 7) 还可以为生物力学 (如 DNA 结构的力学行为) 研究提供新的思路. Bobaru 将分子动力学模拟中常用的原子间作用势函数 (如 Lennard-Jones 势) 引入到 PD 本构函数中来, 不仅准确模拟了纳米纤维网的破坏过程, 还分析了范德华力对纳米纤维强度和韧性的影响机制, 以及纳米纤维网变形破坏的两个主要因素: 方向重构和泊松效应.

图 7 纳米纤维自组织变形的 PD 模拟 [47]

3.3 与其它方法的联系

PD 方法可视为一种考虑非局部作用的无网格方法, 彻底消除了计算的网格依赖性. 但相比传统的无网格法, PD 模型积分形式的运动方程不受非连续性的影响, 在模拟破坏问题时裂纹自然萌生和发展, 而且避免了各种常规无网格方法中的节点影响区重叠、不连续界面跨越判断、拉伸不稳定等问题.

PD 方法又可以视为一种宏观尺度的分子动力学方法. 二者基于粒子间非局部作用的求解思路完全一致. 当将原子作为 PD 结点、将原子间作用势函数作为 PD 本构力函数时, PD 方法就退化为经典分子动力学方法. 基于这一思路, Parks 等 [32,53,54] 对比了 PD 和分子动力学方法的计算体系之后, 将 PD 模型植入成熟的分子动力学软件 LAMMPS 中进行了宏观的冲击破坏模拟. 这一应用研究突破了以往分子动力学 (MD) 模拟在时间与空间尺度上的局限性, 而且在不同尺度的分析中采用同样的计算结构, 为多尺度模拟提供了新思路.

为了与结构分析中应用广泛的有限元法联系起来以便于 PD 方法的应用, Macek[4] 将 PD 模型中的物质点对用有限元中的杆单元来描述, 在有限元软件 (ABAQUS) 中进行了 PD 模型的数值计算, 并将有限元结果和 PD 计算结果进行了比较, 发现二者吻合很好, 且在 PD 模型的有限元计算中避免了传统的网格扭曲和纠缠等问题. 进一步的研究表明, 将工程结构的数值模型划分为 PD 子域和 FEA 子域并在边界上设定镶嵌单元 [4,55], 可以充分利用 FEA 和 PD 二者的优势, 模拟结构破坏和碰撞、冲击、穿透等问题, 从而降低有限元法在三维裂纹扩展和冲击界面变形模拟等方面的困难. 根据这一思路, Silling[56] 和 Kilic[57] 近期分别研究了有限元模型与 PD 模型的结合.

上述应用研究表明, 由于 PD 方法采用同样的非局部积分方程描述不同尺度的连续、非连续力学问题, 因而可以更简单地实现跨尺度数值模拟 [55,58]. 同时, 可以将 PD 方法与已有无网格方法、分子动力学方法和有限元法结合起来, 以实现更高效的多尺度不连续力学问题分析.

4 结 语

经过近十年的发展, PD 方法已初步形成完整的理论和计算体系, 并成功应用于宏、细、微观不连续力学问题特别是各类固体材料和结构的变形、损伤与破坏分析中, 在理论和应用两方面取得

一定的研究进展. 但作为一种新兴的方法, PD 仍然存在大量有待进一步研究的问题.

PD 模型的求解仍属于数值方法的范畴, 已有研究表明, 在模拟无损伤的弹性变形问题时, PD 的计算效率明显低于传统有限元法, 因为消耗在每个结点上的平均计算时间多于有限元法; 在已有 PD 模拟中通常采用定常的结点密度和 "近场范围尺寸", 这在分析不连续、非均匀问题时往往影响精度和效率, 因而需要发展相应的均质化和自适应技术; 此外, 传统的弹、塑、黏性耦合的材料性质及其它率敏感特性在 PD 本构模型中的表述尚待深入研究, 严格的收敛性预测、误差估计和高效的求解算法也需要进一步研究.

现有 PD 模拟大多在物质点对的中心作用基础上增加适当的修正项来描述材料的本构信息, 导致本构关系本身不够精确, 且应用范围有限. Silling 研究组 2007 年提出了修正的 PD 状态模型以及传统应力、应变张量的 PD 状态表述, 拓宽了 PD 方法的应用范围, 但其应用研究还非常少见. 根据修正的 PD 状态理论框架建立相应的 PD 计算体系并应用到实际问题中, 是当前研究的重要任务. 建立多尺度 PD 模型与算法, 将 PD 方法与已有的无网格、分子动力学和有限元等方法有效结合起来进行跨尺度非线性不连续力学问题的数值模拟, 将是 PD 应用研究的一个有意义的方向.

虽然 PD 方法还存在众多有待完善之处, 但其宏微观统一和非局部积分特色在分析不同尺度的不连续力学问题时已显示出其它传统方法所不具备的强大优势, 相信随着研究的深入, PD 方法的理论、模型和计算体系将进一步完善, 并在不连续力学问题特别是工程材料和结构的渐进破坏分析中得到更广泛的应用.

致　谢: 感谢美国波音公司 (The Boeing Company)Dr. Jifeng Xu 对本文研究的指导和帮助.

参 考 文 献

1 Silling S A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(1): 175∼209

2 Kilic B. Peridynamic theory for progressive failure prediction in homogeneous and heterogeneous materials: [PhD Thesis]. Tucson: The University of Arizona, 2008

3 Kilic B, Madenci E. Structural stability and failure analysis using peridynamic theory. *International Journal of Non-linear Mechanics*, 2009, 44(8): 845∼854

4 Macek R W, Silling S A. Peridynamics via finite element analysis. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2007, 43(15): 1169∼1178

5 Silling S A, Askari E. A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics. *Computers and Structures*, 2005, 83(17-18): 1526∼1535

6 Weckner O, Abeyaratne R. The effect of long-range forces on the dynamics of a bar. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(3): 705∼728

7 Weckner O, Emmrich E. Numerical simulation of the dynamics of a non-local inhomogeneous, infinite bar. *Journal of Computational and Applied Mechanics*, 2005, 6(2): 311∼319

8 Askari E, Xu J, Silling S A. Peridynamic analysis of damage and failure in composites. In: 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibition, No. 2006-88, Reno, Nevada, 2006

9 Silling S A. Peridynamic modeling of the failure of heterogeneous solids. Report on ARO Workshop on Analysis and Design of New Engineered Materials and Systems with Applications, Albuquerque, New Mexico, 2002

10 Silling S A, Kahan S. Peridynamic modeling of structural damage and failure. In: Proceedings of Salishan Conference on High Speed Computing, Gleneden Beach, Oregon, 2004

11 Weckner O, Askari A, Xu J, et al. Damage and failure analysis based on peridynamics -theory and applications. In: 48th AIAA/ASME/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference, No. 2007-2314, Honolulu, Hawaii, 2007

12 Xu J, Askari A, Weckner O, et al. Damage and failure analysis of composite laminates under biaxial loads. In: 48th AIAA/ASME/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics and Materials Conference, No. 2007-2315, Honolulu, Hawaii, 2007

13 Zimmermann M. A continuum theory with long-range forces for solids:[PhD Thesis], Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, 2005

14 Lehoucq R B, Silling S A. Force flux and the peridynamic stress tensor. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(4): 1566∼1577

15 Irving J, Kirkwood J. The statistical mechanical theory of transport processes. IV: the equations of hydrodynamics. *Journal of Chemistry Physics*, 1950, 18: 817∼829

16 Noll W. Die herleitung der grundgleichungen der thermomechanik der kontinua aus der statistischen mechanik. *Journal of Rational Mechanics and Analysis*, 1955, 4: 627∼646

17 Weckner O, Brunk G, Epton M A,et al. Comparison between local elasticity and non-local peridynamics. Sandia National Laboratory Report, SAND2009-1109J, Albuquerque, New Mexico, 2009

18 Kilic B, Agwai A, Madenci E. Peridynamic theory for progressive damage prediction in center-cracked composite laminates. *Composite Structures*, 2009, 90(2): 141∼151

19 Kilic B, Madenci E. Prediction of crack paths in a quenched glass plate by using peridynamic theory. *International Journal of Fracture*, 2009, 156(2): 165∼177

20 Bobaru F, Yang M, Alves L F, et al. Convergence, adaptive refinement, and scaling in 1D peridynamics. *Inter-*

national Journal for Numerical Methods in Engineering, 2009, 77(6): 852∼877

21 Silling S A. Dynamic fracture modeling with a meshfree peridynamic code. In: Second MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, MIT, Massachusettes, 2003

22 EMU web: http://www.sandia.gov/emu/emu.htm

23 Xie W. Peridyanmic flux-corrected transport algorithm for shock wave studies: [Master thesis]. Lincoln: The University of Nebraska-Lincoln, 2005

24 Emmrich E, Weckner O. Analysis and numerical approximation of an integro-differential equation modeling nonlocal effects in linear elasticity. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 2007, 12(4): 363∼384

25 Lapidus L, Pinder G F. Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering. New York: Wiley, 1982

26 Bobaru F. Influence of van der Waals forces on increasing the strength and toughness in dynamic fracture of nanofibre networks: a peridynamic approach. *Modelling and Simulations in Material Science and Engineering*, 2007, 15(5): 397∼417

27 Silling S A, Lehoucq R. Atoms and peridynamic continua. Sandia National Laboratory Report, SAND 2007-6818C, Albuquerque, New Mexico, 2007

28 Bobaru F, Silling S A, Jiang H. Peridynamic fracture and damage modeling of membranes and nanofiber networks. In: Proceedings of the XI International Conference on Fracture, Turin, 2005, No.5748. 1∼6

29 Bobaru F, Silling S A. Peridynamic 3D problems of nanofiber networks and carbon nanotube-reinforced composites. In: Proceedings of Numiform, Materials and Design, American Institute of Physics, 2004. 1565∼1570

30 Emmrich E, Weckner O. On the well-posedness of the linear peridynamic model and its convergence towards the Navier equation of linear elasticity. *Communications in Mathematical Sciences*, 2007, 5(4): 851∼864

31 Bobaru F, Alves L A, Silling S A, et al. Dynamic crack branching and adaptive refinement in peridynamics. In: Proceedings of the 8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) & the 5th European Congress on Comutational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008), Venice, Italy, 2008

32 Parks M L, Lehoucq R B, Plimpton S J, et al. Implementing peridynamics within a molecular dynamic code. *Computer Physics Communications*, 2008, 179(11): 777∼783

33 Silling S A, Epton M, Weckner O, et al. Peridynamic states and constitutive modeling. *Journal of Elasticity*, 2007, 88(2): 151∼184

34 Liu W K, Karpov E G., Zhang S, et al. An introduction to computational nanomechanics and materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004, 193(17-20): 1529∼1578

35 Warren T L, Silling S A, Askari A, et al. A non-ordinary state-based peridynamic method to model solid material deformation and fracture. *International Journal of Solids and Structures*, 2009, 46(5): 1186∼1195

36 Silling S A. Linearized theory of peridynamic states. Sandia National Laboratory Report, SAND2009-2458, Albuquerque, New Mexico, 2009

37 Silling S A, Zimmermann M, Abeyaratne R. Deformation of a peridynamic bar. *Journal of Elasticity*, 2003, 73(1-3): 173∼190.

38 Grah M, Alzebdeh K, Sheng P, et al. Brittle intergranular failure in 2D microstructures: Experiments and computer simulations. *Acta Materialia*, 1996, 44(10): 4003∼4018

39 Maiti S, Rangaswamy K, Geubelle P. Mesoscale analysis of dynamic fragmentation of ceramics under tension. *Acta Materialia*, 2005, 53(3): 823∼834

40 Lee B T, Han B D, Kim H D. Comparison of fracture characteristic of silicon nitride ceramics with and without second crystalline phase. *Materials Letters*, 2003, 58(1): 74∼79

41 Askari E, Bobaru F, Lehoucq R.B, et al. Peridynamics for multiscale materials modeling. *Journal of Physics: Conference Series* 125, 2008-012078, doi:10.1088/1742-6596/125/1/012078

42 Gerstle W, Sau N. Peridynamic modeling of concrete structures. In: Proceedings of the 5th International Conference on Fracture Mechanics of Concrete Structures, 2004. 949∼956

43 Gerstle W, Sau N. Peridynamic modeling of plain and reinforced concrete structures. In: 18th Internatinal Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT 18), Beijing, China, 2005

44 Gerstle W, Sau N, Silling S A. Peridynamic modeling of concrete structures. *Nuclear Engineering and Design*, 2007, 237(12-13): 1250∼1258

45 Demmie P N, Silling S A. An approach to modeling extreme loading of structures using peridynamics. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 2007, 2(10): 1921∼1945

46 Silling S A, Lehoucq R B, Askari A. Peridynamic Modeling of the Dynamic Response of Heterogeneous Media. Sandia National Laboratory Report, SAND2009-0125C, Albuquerque, New Mexico, 2009

47 Silling S A, Bobaru F. Peridynamic modeling of membranes and fibers. *International Journal of Non-linear Mechanics*, 2005, 40(2-3): 395∼409

48 Silling S A, Demmie P, Warren T L. Peridynamic simulation of high-rate material failure. In: 2007 ASME Applied Mechanics and Materials Conference, Austin, TX, 2007

49 Dayal K, Bhattacharya K. Kinetics of phase transformations in the peridynamic formulation of continuum mechanics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2006, 54(9): 1811∼1842

50 Abeyaratne R, Knowles J K. Kinetic relations and the propagation of phase boundaries in solids. *Archive for Rational Mechanics and Analysis,* 1991, 114(2): 119∼154

51 Kilic B, Madenci E. Peridynamic theory for thermomechanical analysis. *IEEE Transactions on Advanced Packaging*, 2010, 33(1): 97∼105

52 Lehoucq R B, Silling S A. Statistical coarse-graining of atomistics into peridynamics. Sandia National Laboratory Report, SAND2007-6410, Albuquerque, New Mexico, 2007

53 Parks M L, Seleson P, Plimpton S J, et al. Peridynamics with LAMMPS: A User Guide. Sandia National Labora-

tory Report, SAND2008-0135, Albuquerque, New Mexico, 2008

54 Seleson P, Parks M L, Gunzburger M, et al. Peridynamics as an upscaling of molecular dynamics. *Multiscale Modeling and Simulation*, 2009, 8(1): 204∼227

55 Silling S A, Lehoucq R B. Convergence of peridynamics to classical elasticity theory. *Journal of Elasticity*, 2008, 93(1): 13∼37

56 Silling S A. Unifying the mechanics of continua, cracks, and particles. Sandia National Laboratory Report, SAND2009-5444P, Albuquerque, New Mexico, 2009

57 Kilic B, Madenci E. Coupling of peridynamic theory and finite element method. In 50th AIAA/ASME /ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference, No. 2009-2395, Palm Springs, California, 2009

58 Silling S A, Lehoucq R B, Parks M L. Connecting length scales with peridynamic mechanics. Sandia National Laboratory Report, SAND2009-3973C, Albuquerque, New Mexico, 2009

A REVIEW ON PERIDYNAMICS(PD) METHOD AND ITS APPLICATIONS*

HUANG Dan[1,2,†] ZHANG Qing[1,2] QIAO Pizhong[1,3] SHEN Feng[1,2]

[1] State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China
[2] Department of Engineering Mechanics, Hohai University, Nanjing 210098, China
[3]Department of Civil and Environmental Engineering, Washington State University, Pullman, WA, 99164-2910, USA

Abstract Peridynamics (PD) is a recently developed theory in solid mechanics that employs a nonlocal model of force interaction, and replaces the partial differential equations, such as the stress-strain relationship of the classical continuum theory, by an integral operator that sums up internal forces separated by finite distances. It allows discontinuities of various types to be modeled without application of special techniques to the discontinuous field and shows a promising prospect for solving practical problems in which discontinuities form and grow spontaneously. Peridynamics has been successfully applied to damage and failure problems at both macro- and micro-scales with satisfactory solution precision and numerical efficiency. Without pathological defects of traditional methods when facing discontinuous problems, and excluding the computational limitations in length and time scales, peridynamics shows great potential analogous but advantageous to both classical meshfree and molecular dynamic methods. The present paper first reviews its theoretical basis, numerical scheme and modeling method, and then elucidates its application to discontinuous problems at different scale, including damage, fracture, impact, penetration and stability analysis for macro-scale homogeneous and heterogeneous materials and structures, kinetics analysis for phase transformations and atomistic analysis for nanoscale materials. Finally, some unsolved problems and future research trends in PD are discussed.

Keywords discontinuity, numerical simulation, peridynamics, nonlocal model

*The project supported by the National Basic Research Program of China(2007CB714104), the National Natural Science Foundation of China (10972072), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities and the Special Fund of State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering at Hohai University (2009587012, 2009585912)

† E-mail: danhuang@hhu.edu.cn