

文章编号: 1000-4750(2016)10-0001-23

材料结构状态集合分析理论

王梦恕¹, 卫振海², 张顶立¹

(1. 北京交通大学土木建筑工程学院, 北京 100044; 2. 后勤指挥学院后方专业勤务系, 北京 100858)

摘 要: 材料的结构性具有普遍性, 材料的结构性研究是目前这一领域的研究难点和重点问题。材料结构状态集合分析理论是研究材料结构性问题的一种新的方法。材料结构状态集合分析理论是以材料结构的状态集合为研究对象, 以材料的微结构元集合为基础, 通过对材料微结构元配分函数的分析, 建立起材料宏观层面上的材料结构状态集合函数方程, 得到材料的整体宏观性能描述方法。根据对材料结构的宏观强度、材料结构的刚度和材料几何状态的变化, 建立了材料结构状态集合函数的控制方程; 通过材料微结构元集合的分布状态分析, 建立了材料不同结构状态下的微结构元的配分函数方程; 在对微结构元组构关系分析的基础上, 建立了微结构元的具体分析方法和宏观参数之间的关系; 讨论了材料结构状态集合分析理论下的若干理论问题及今后需要做的工作。

关键词: 结构性材料; 颗粒材料模型; 状态集合; 配分函数; 微结构元

中图分类号: TB303 文献标志码: A doi: 10.6052/j.issn.1000-4750.2016.05.ST02

STATE SET THEORY OF THE STRUCTURAL MATERIAL ANALYSIS

WANG Meng-shu¹, WEI Zhen-hai², ZHANG Ding-li¹

(1. School of Civil Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China;

2. School of Rear Professional Service, Logistics Command Academy, Beijing 100858, China)

Abstract: The structural properties of materials are universal. The structural study of materials is a difficult and important problem in this field. The theory of state set analysis of material structure is a new method to study the structural problems of materials. The theory of state set analysis of material structure is based on the collection of the state of material structure and the microstructure element set of material. Based on the analysis of the distribution function of the microstructure element of material, a set function equation of the state of material structure at the macro level is established. According to the macroscopic strength of material structure, the stiffness of material structure, the change of the geometrical state of material and the control equation of the state set function of material structure are established. By the analysis of the distribution state of the micro structure element of material, the partition function equation of the micro structure of material is formed. On the basis of the analysis of the micro structure element, the relationship between the micro structure and the macro structure parameters is established. Some theoretical problems in state set analysis of the material structure and the required future work are discussed.

Key words: structural materials; granular material model; all state set; distribution function; microstructure unit

材料的结构性具有普遍性, 是材料的一般性特征。材料的结构性可以理解为材料的非均匀特性, 这种非均匀性即有材料物理性能方面的非均匀性, 也包括材料在空间分布上的非均匀性, 这种非均匀性对材料的力学性能有着重要的影响。

材料的结构性可分为规则结构性和非规则结构性。规则结构性材料的典型是晶体材料, 这方面的研究工作相对比较成熟^[1-2]。对于非规则结构性材料的典型就是岩土材料, 而研究岩土材料最基本的理论目前主要是经典弹塑性理论及相关理论, 但

收稿日期: 2016-05-25; 修改日期: 2016-08-24

通讯作者: 卫振海(1957—), 男, 河南安阳人, 教授, 博士, 主要从事应用结构及地下工程研究(E-mail: wzhai@vip.sina.com).

作者简介: 王梦恕(1938—), 男, 河南人, 院士, 主要从事地下工程及岩土工程研究(E-mail: wms32730@263.net);

张顶立(1963—), 男, 江苏人, 教授, 博士, 主要从事地下工程及岩土工程研究(E-mail: zhang-dingli@263.net).

经典弹塑性理论是建立在均匀、连续、各向同性和无限可分基础上的,这和强结构性材料岩土材料的特性相差甚远。也可以认为,经典弹塑性理论所研究的材料模型是一种无结构的材料模型,将此用于研究结构性材料不可避免地会出现一些问题。郑颖人等^[3]对经典塑性力学用于岩土类材料存在的问题进行了总结。岩土材料具有高度的离散性,很多特征都难以用现有的连续体力学理论予以解释,如在低围压下粗粒土的应变软化特征、剪胀(缩)性、剪切试验中的剪切带现象、模拟试验中观察到的力链现象、粗粒土蠕变性的力学意义、试验中的不确定性等等。土颗粒间相互位置排列和粒间作用力对于粗粒土的力学性质有重要的影响。为了解决材料的结构性,特别是对于岩土材料的结构性问题,许多学者在理论与实验方面都做了大量的工作。在理论上,将建立结构性材料模型作为 21 世纪土力学的核心问题^[4-6]。到目前为止,结构性材料模型的研究,仍然方兴未艾,百花齐放,未能有统一的认识。沈珠江等^[7-18]提出过复合体模型、堆砌体模型以及统一变形模型基础上发展的岩土破坏力学模型;另外类似的经过各种的修正的材料结构模型也非常之多^[19-23]。在实验方面,许多学者针对不同类型的岩土材料进行了大量的探索性工作,并引进了许多先进的技术实验手段^[24],以期更深入地了解 and 掌握结构性材料的性能变化特征。鉴于结构性材料的性能与材料的微观特性密切相关,而微观结构的变化在实验中进行系统观察存在很大的难度,有不少学者采用离散元的方法进行数值分析和模拟,以期更系统地掌握结构性材料的特性。在对现有理论模型和实验考察的基础上,考虑到经典弹塑性理论应用于结构性材料的局限性,从材料结构状态集合的思想出发,卫振海、王梦恕、张顶立提出了材料结构全状态理论^[25-26]。这一理论将材料结构的宏观参数归结为三个方面:材料结构的强度、结构的弹性模量和结构几何状态。由此三个参数来描述结构性材料的整体宏观特性。本文根据这一理论的基本思想,从材料的基本构成要素出发,建立了材料微结构元构成的配分函数和微结构元的分析方法,从而解决了材料结构状态集合分析理论中的状态集合函数控制方程中能量密度函数与材料微结构参数的关联问题,使影响材料结构状态集合函数的宏观参数与微结构参数建立起了联系,并由此得到了一些新的概念和结论。至此,材料结构状态集合分析

理论形成了一个较为完整的框架体系。

1 材料结构状态集合分析理论的基本思想、概念和方法

材料结构状态集合分析理论在总结梳理现有各种理论模型和实验的基础上,形成了相对特有的思路、概念和方法。

1.1 基本思路

材料结构状态集合分析理论的基本思想主要由以下三个方面组成:

1) 对材料的基本认识

材料的结构性具有普遍性。对于一般意义上的材料,可以这样认为:材料由均匀向非均匀方向发展,材料结构性也逐渐增强。这个过程可以根据非均匀性发展的程度分为三个阶段:在第 1 阶段,主要形成大小不一、形态各异的非均匀的小区域,小区域之间虽然性能不一致,但在几何上仍然是连续的。这些小区域可以称为区畴;第 2 阶段,非均匀性继续发展,主要是在几何方面形成了大小不一,长短不一,很明显的裂隙。这些裂隙从几何上将材料的连续性破坏,形成了一些非连续的区域或方向,这时的裂隙可以称之为节理;第 3 阶段,裂隙的进一步发展和贯通,将连续一体的材料分隔为大大小小的块体或颗粒。这些块体和颗粒可以在外部力的作用下,发生相对运动。当然实际的材料形成的过程可能更为复杂,如土的形成,就可能是各种不同性质的颗粒堆积而成。但他们的状态总可以归结为以上三种情况的一种或他们的组合。根据以上三种情况,可以将材料简化为三种模型:

材料区畴模型. 这一类材料,在受到外部作用时,材料整体上始终保持一种连续的状态,极少甚至不会出现裂缝等现象。但在材料内部的力学性质或密度等物理性质是不均匀的,形成许多各自性质不同的小区域。由于这些力学或物理性质不同的小区域的存在,使材料的整体性能受到影响。对于这类材料的性能用区畴材料模型来描述。区畴材料模型的本质是用各个不同物理和力学性能的区域来描述材料的结构性。

材料节理模型. 材料节理模型与材料区畴模型相比,是用来描述当材料中存在一系列长短不一的裂缝时的材料性能。由于大量裂缝的存在,材料的连续性受到破坏,材料的结构性也由此产生。对于节理材料模型,裂缝的几何形态分布、裂缝间的

材料性能和由于裂缝存在形成的组构关系形态是描述材料结构性的主要参数。材料节理模型对于岩石材料是非常接近的描述模型。岩石中存在的大量裂缝,也称为节理,其分布情况对材料的性能有着极大的影响。对于一些易于开裂的材料,材料节理模型是研究其性能的一个重要的、比较接近的材料结构模型。

材料颗粒模型. 材料颗粒模型认为材料是由大小不同、形态不同、相互作用关系也不同的大量颗粒组成。材料的结构性受颗粒之间的连接性能、颗粒连接的分布和颗粒连接构成的组构关系等影响。材料颗粒模型在宏观上用材料的结构状态来描述材料的结构性能,而材料的宏观结构性能又由颗粒尺度上颗粒所构成的结构状态所决定。

三种材料模型从材料性能或几何形态上讲,是一个渐变的过程。区畴材料模型所描述的材料只是材料性能在小区域上的不均匀性,材料的几何形态仍然保持着连续性。材料节理模型描述的材料中存在大量裂缝或称为节理,将材料的连续性破坏,导致材料的不均匀性或宏观上的结构性,但材料分离的程度还是非常有限的。材料颗粒模型则是认为材料由一系列相互独立的颗粒所组成,材料之间的连续性已完全不存在。材料受到外部作用时,颗粒的移动、转动及分离是其主要特征。材料颗粒模型是最为复杂的模型,但正是由于其复杂性,也是最能反映材料结构性的模型。大多数的材料,经过一定程度的简化,都可以用材料颗粒模型来描述。

对于材料颗粒模型,影响材料宏观性能的主要由颗粒的物理及几何性能、颗粒间的连接性能和颗粒构成的组构关系三个因素决定。而这三个因素即可独立的影响材料的宏观性能,相互之间又可能产生影响。颗粒的物理及几何性能是影响材料宏观性能的基础,颗粒间的连接性能决定着颗粒材料的极限承载力或强度,颗粒的组构关系往往对颗粒材料的宏观性能特别是几何状态的变化有着不可忽视的影响。

对于结构性材料的变形或应变,在宏观上主要由两部分组成:一部分是材料结构本身的弹性变形或应变,另一部分是材料组构状态的变化而引起的变形,这一部分在宏观上可以认为是塑性变形。

2) 状态集合和弹性核的思想

材料结构状态集合分析理论认为,任何材料从基本构成来讲,都存在着一个基本要素集合,这一

要素集合反映了该材料的力学基本性质,是这一材料的基本代表特征。基本要素集合可以有:基本体要素集合,如颗粒可以构成材料的基本体要素,颗粒由其形态不同,而构成特定的颗粒体要素集合;微结构元要素集合,由若干颗粒构成各种类型的结构元形态,所有微结构元形态构成特定材料的微结构元要素集合。特定的结构性材料,必然存在着特定的微结构元集合。这些特定的微结构元通过一定的可能的组合比例关系,也就是在一定的配分函数下,形成特定的结构状态。随着比例关系或配分函数的变化,材料构成了许多不同的结构状态,所有这些结构状态的整体,就构成了结构状态的集合。材料的某种结构状态将反映材料在这一状态的特性,所有状态的集合反映出的特性,将是材料的整体特性。这一由材料状态集合而决定的材料整体特性,是材料本身特性及属性的反映。

材料结构的特定状态,决定材料抵抗外部影响的能力,如抵抗外部荷载的能力,这就是材料的结构强度。在这一状态下,当外部荷载不超过材料的结构强度时,材料结构在宏观上认为处于弹性状态。因此,也就存在着材料的结构弹性模量。当外部荷载超过了材料的结构强度时,材料的结构状态将发生变化,从一种状态转变为另一种状态。新的结构状态也存在着结构强度和结构弹性模量。也就是说,每种结构状态都会存在着相应的结构强度和结构弹性模量。所有结构状态的结构强度构成了一个强度面,在强度面之下就存在着保持弹性的结构状态弹性集合,这个集合处于结构强度面之内,所以可以认为是材料的一个弹性核集合。在弹性核集合的内部,材料的结构是不会改变的,在弹性核集合的边界上是材料结构的强度面。在材料结构的强度面上,材料结构将发生变化也就体现为材料宏观上的塑性状态和变形。由于材料的结构状态与材料的几何状态有关,所以材料结构强度面同样受到几何状态参数的影响。

3) 分析问题遵循的原理

根据对材料结构性的认识,材料的结构状态是由一系列的基本微结构元组成,而基本的微结构元又由一系列结构要素形态组合而成。而材料的整体性能由材料的结构状态集合所决定,材料的结构状态又由材料的微结构元集合所决定,材料的微结构元性能又进一步受材料的基本要素集合的影响。在这由低一级的单元向高一级的状态过渡时,材料的

各级状态形成应遵守一些基本的原理,这主要有以下几个方面:

最小能量原理. 材料结构状态的特征可以由三个参数来描述:材料结构的强度、结构弹性模量和材料结构几何状态(组构形态)。由这三个参数描述的材料结构弹性核集合边界,是材料保持其结构状态稳定的最小曲面,也就是说材料结构弹性核集合边界是一个紧曲面。在这一曲面上,任意两点代表了材料结构的两种状态。由于这时材料结构已达到其最大强度(进入结构的塑性状态),从一种状态过渡到另一种状态时,是需要消耗能量的。我们认为要实现这种变化,一个系统总是以最小的能量消耗代价来完成(当有其约束条件时,要考虑约束条件的影响),这一概念就是最小能量原理。

最大熵原理. 结构性材料的宏观状态,可以由不同形态微结构元按某种概率分布构成,而概率分布函数应该由材料受到环境约束后,自身微结构元演化特性所决定。微结构元的不同组合,类似于统计物理中的微态,其出现的概率由组合的方式所决定,总是按最可几状态出现。因此可以认为,材料结构状态的变化规律有条件地遵守玻尔兹曼的最大熵原理,这里的条件就是各种不同环境的约束。对于玻尔兹曼熵原理有:

$$S = -k \sum p_i \ln p_i \quad (1)$$

这里 p_i 为微态的概率。

根据此原理,材料的状态在受到强度、弹性模量和几何状态等宏观条件约束的情况下,其熵值应取最大值,由此形成的微状态分布,应是系统演化的最终状态。对于不同的物理系统达到最终状态的时间是不一样的,特别是对于固体的结构性材料,这一过渡过程可能需要较长的时间,甚至是很长时间。因此,由最大熵原理决定的状态分布,是一个理论上的结果和结构演化的趋向。对于固体材料,颗粒或结构的演化受到许多条件的限制,将这些条件恰当地描述出来,对于求得随时间演化的状态分布是更接近于实际情况(这将另文进行讨论)。这时方程应该是:

$$\begin{cases} [S]_{\max} = -k \sum p_i \ln p_i, & \text{目标函数} \\ K = \sum u_i, & \text{约束条件} \end{cases} \quad (2)$$

系统向最终状态的演化过程是时间的函数,可以归结为动力学问题,这时的约束条件应该和时间有关。

微结构元集合存在原理. 根据材料结构状态集合分析理论的思想,认为任何材料的结构性都存在其特定性,这种特定性是由其构成的基本要素所决定,而基本的要素构成的微结构元集合也同样带有基本要素所赋予的特征。也就是说,任何特定的材料结构的状态集合,都可以找到一个构成所有这些状态的基本结构元集合。这实际上是假定无论材料的结构形态怎样变化,总是可以用这个集合中部分或全部单元按某种方式组合而成(图 1)。

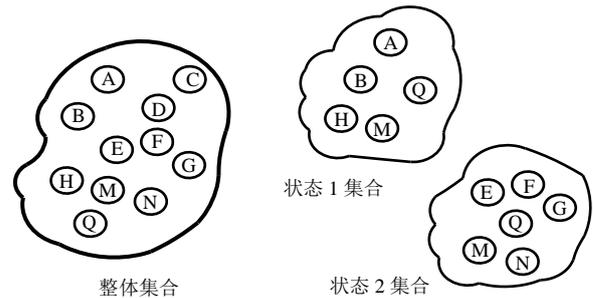


图 1 微结构元集合

Fig.1 Micro structure element set

1.2 几个重要概念

材料结构状态集合分析理论在分析结构性材料时,形成了一些新的重要概念,这些概念是这一理论的基础。这主要包括材料结构状态集合函数、材料结构配分函数、结构元集合、统计域等。

1) 材料结构状态集合函数

材料结构在宏观上可以由材料结构的强度、结构弹性模量和结构几何状态三类参数来描述。由于从力学角度上讲,任何材料结构的强度都是有限的,因此材料结构存在着一个由材料结构强度限定的域值。从结构状态集合上讲,由材料结构强度所限定的域值所决定的存在一个具有统计意义上的包裹材料弹性内核的曲面。这一曲面是材料结构的强度随材料结构弹性模量和材料结构几何状态的变化而形成。曲面包括了材料结构的所有可能的状态,如果这一曲面可以用一函数来进行描述,则将其称为材料结构的状态集合函数。

当材料的结构几何状态参数采用组构应变(也就是宏观上的塑性应变)来描述时,材料结构状态集合函数是在由应力、刚度和应变多变量构成的相空间中的函数。在一般意义上是一多维曲面(超曲面),其曲面特征是特定材料性能的整体反映。由于这一函数包括了材料结构的所有可能状态,因此材料的所有可能的变化均必然反映在这一函数曲面上。因

此, 材料结构的任何变化所引起的应力强度、材料刚度和几何应变都是必然位于这一函数曲面上, 这一点在后面的分析中会有更为具体的描述。

2) 材料结构配分函数

结构性材料的力学性能, 根据材料结构状态集合分析理论认为, 在构成材料结构的微结构元集合和特定材料结构状态下, 材料微结构元的分布比例及微结构元间的相互作用决定了材料的宏观性能。材料的特定结构状态是由构成这一材料的微结构元集合中的部分或全部微结构元类型按照某种特定比例组合而成, 这一组合比例也称为分布, 或称为材料结构的配分函数。不同的材料结构状态其配分函数不同, 材料结构配分函数反映了不同微结构元在特定状态下的比例分布情况, 这一函数的变化在宏观上会影响到材料的性能,

由于结构性材料的复杂性, 对于一般结构性材料, 微结构元的组合及其比例关系具有随机性, 这是结构性材料的重要特征。为了能有效地描述和反映这一特征, 可以用不同类型微结构元配分函数来描述这一特征。设在空间某一点上, 某一形态的微结构元存在的配分函数为:

$$f = f(\mathbf{Z}, \mathbf{S}) \quad (3)$$

这里 \mathbf{Z} 和 \mathbf{S} 分别是材料微结构元的空间坐标和微结构元向量参数。在这里无论是空间向量参数, 还是微结构元向量参数, 为了分析上的方便, 假定为可以连续变化的量。

根据微结构元的分布概率(配分函数), 材料的宏观特性将会随这一分布的变化而变化, 也就是说, 材料的宏观特性将是微结构元分布概率的函数。因此, 不同材料的结构状态, 就变换为微结构元不同形态的概率分布函数的变化。也就是不同的概率分布函数形态, 将代表着不同的材料结构状态。

3) 微结构元集合

根据材料结构状态集合分析理论的思想^[25-26], 材料结构的演化是所有可能的结构状态的集合。将这一思想应用于此, 在材料所有可能形态变化中, 将最小的不必再划分的微结构形态抽取出来, 以此作为材料各种结构状态的基础。这些构成所有材料结构可能状态的基本单元的总, 就构成了该材料的微结构元的集合。也就是说, 无论材料的结构形态怎样变化, 总是可以用这个集合中部分或全部单元按某种方式组合而成(图 1)。

微结构元集合或称微元集合, 集中了特定材料所有可能的在材料宏观形态下, 存在的最小微结构形态的所有形态。所谓材料的结构状态, 就是这些微结构元按照某种分布和组合而形成, 同时在宏观上表现出不同的状态特征。微结构元集合的思想, 将复杂的结构性材料的构成(或不同的结构状态), 抽象为由一组基本单元结构按照一定的组合而形成。或者反过来讲, 认为任何结构性材料总是存在着一组构成其整体的微结构元集合。对于特定的材料, 存在特定的微结构元集合, 与材料的状态无关, 只与材料的种类有关。从某种意义上讲, 材料的微结构元集合, 反映的是该种材料的特征之一。不同的材料, 其微结构元集合不同, 可以认为是区别材料类别的一项重要指标。(这一思想可用于研究结构性材料的分类, 通过观察、实验及理论分析, 建立一种材料分类的新方法, 这对于区分材料的不同力学性质具有特殊意义)。

材料微结构元集合实质是构成材料结构状态的最小力学单元类型的总体, 他是构成特定结构状态的基础, 他的力学特性将影响到材料特定结构状态的宏观力学性能。微结构元集合的观点是将构成材料基本要素的物理和几何特征用力学方法来描述, 是建立起材料基本要素和材料宏观力学量之间关系的过渡环节。

4) 统计域

经典弹塑性力学的材料模型是均匀、连续、无限可分, 也就是可以研究一个没有空间大小的点的材料性能, 但对结构性材料来讲, 这一模型已不能适应。结构性材料一般具有一定的微结构特征, 微结构的尺度一般不具有无限小的特性, 材料的性能受微结构的影响比较大, 分析问题的尺度受到一定的限制。因此, 在材料结构状态集合分析理论中, 是通过引入一个一定空间区域来研究材料的结构性能。这个空间范围区域的大小要满足能在此区域上获得材料微结构的具有统计意义的宏观参数, 因此这一区域称为统计域。

在实际问题的分析中, 观察的尺度是根据分析问题的目的设置的, 分析的目的不同, 可能需要不同尺度上的观察点。对于一般结构性材料的力学问题, 特别是根据材料结构状态集合分析理论, 一般更多关心的是其强度、弹性模量和材料结构的变形特征。当研究问题的关注点是材料结构性时,

其观察尺度是由问题的宏观尺度和微结构的微观尺度决定的,统计域就是建立起宏观尺度和微结构尺度之间关系的一个区域。这个区域在宏观尺度上要能代表接近于某点材料的宏观性能参数,在微结构尺度上要能将微结构的性能以统计的特性反映出来。具体来讲,就是统计域的尺度应能很好的消除由于尺度效应所产生的对宏观特性分析的影响。

1.3 基本方法

材料结构状态集合分析理论的分析方法主要包括三大部分:材料结构状态集合函数的控制方程、材料结构配分函数方程和材料微结构元分析方法。

1.3.1 材料结构状态集合函数的控制方程

材料结构状态集合分析理论认为,由材料结构强度、材料结构弹性模量和材料的组构(塑性)应变三组参数描述的材料结构状态,对于特定的结构性材料认为三者之间构成一函数关系——材料结构状态集合函数。目前为止,我们尚无法直接从理论上得到这一关系的显式表达式,但可以根据最小能量原理得到其控制方程(某种约束条件下)。

1) 基本假定

为了求得材料结构状态集合函数的具体形态,作如下假定:

① 材料结构状态集合函数参数由材料结构的强度、刚度和结构状态几何应变组成;

② 材料结构状态集合函数曲面是材料保持可能的结构状态的极限面(最大面),也可以认为是弹性核的包络面;

③ 结构状态的约束量受弹性应变能密度变化的影响;

④ 材料的结构强度、刚度和结构状态的几何应变可以表达为参数形式。

2) 分析模型

设材料的结构状态可以表达为如下形式:

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = \sigma_{ij}(\mathbf{S}) \\ D_{ijkl} = D_{ijkl}(\mathbf{S}), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(\mathbf{S}) \end{cases} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{S} = [s_1, s_2, s_3, \dots, s_n]$, $s_1, s_2, s_3, \dots, s_n$ 为材料结构参数。

为了书写上的方便,将式(4)中的各分量按一定秩序进行排列,并规范化以消除量纲的影响,令:

$$\begin{cases} \omega_m = \sigma_{ij}(\mathbf{S}), & m = i(i-1) + j \\ \omega_m = D_{ijkl}(\mathbf{S}), & m = i(i-1) + j + 9 + \\ & 3^2(k-1) + 3^3(l-1) \\ \omega_m = \varepsilon_{ij}(\mathbf{S}), & m = i(i-1) + j + 9 + 3^4 \end{cases} \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (5)$$

这样就有:

$$\omega_m = \omega_m(\mathbf{S}), \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

3) 状态集合函数方程

考虑由式(6)构成的广义曲面的面积为:

$$A = \int_{\Omega} \sqrt{\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})} d\Omega \quad (7)$$

其中: Ω 为结构参数 \mathbf{S} 定义的广义区域; $\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ 为行列式, \mathbf{J} 的具体形式如下:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \omega_1}{\partial s_1} & \frac{\partial \omega_1}{\partial s_2} & \dots & \frac{\partial \omega_1}{\partial s_m} \\ \frac{\partial \omega_2}{\partial s_1} & \frac{\partial \omega_2}{\partial s_2} & \dots & \frac{\partial \omega_2}{\partial s_m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \omega_n}{\partial s_1} & \frac{\partial \omega_n}{\partial s_2} & \dots & \frac{\partial \omega_n}{\partial s_m} \end{bmatrix}_{n \times m} \quad (8)$$

\mathbf{J}^T 为 \mathbf{J} 的转置矩阵。

设材料结构弹性能密度变化函数存在 $\int_{\Omega} U d\Omega = C_0$, 一般情况下 $U = U(\sigma_{ij})$ 。这样就得到泛函表达式:

$$H = \int_{\Omega} (\sqrt{\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})} + \lambda U) d\Omega \quad (9)$$

式中, λ 为待定参数。

材料结构状态集合函数满足式(9)取极值时的状态。令: $H = \sqrt{\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})} + \lambda U$, 因此有欧拉方程:

$$\frac{\partial H}{\partial \omega_i} - \sum_{j=1}^m \frac{\partial}{\partial s_j} \left(\frac{\partial H}{\partial p_j^i} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (10)$$

这里 $p_j^i = \frac{\partial \omega_i}{\partial s_j}$ 。

$$\text{又: } \mathbf{J}^T \mathbf{J} = \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial \omega_i}{\partial s_j} \frac{\partial \omega_i}{\partial s_k} \right]_{m \times m} = \left[\sum_{i=1}^n p_j^i p_k^i \right]_{m \times m}$$

所以,

$$\frac{\partial}{\partial p_k^l} \det(\mathbf{J}^T \mathbf{J}) = 2[p_1^l A_{1,k} + p_2^l A_{2,k} + \dots + p_m^l A_{m,k}] = 2 \sum_{i=1}^m p_j^l A_{j,k} \quad (11)$$

这里 $A_{j,k}$ 为 $\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})$ 的代数余子式。

因此, 欧拉方程又可以写为如下形式:

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial}{\partial s_j} \left(\frac{\sum_{i=1}^m p_j^i A_{j,k}}{\sqrt{\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})}} \right) - \lambda \frac{\partial U}{\partial \omega_j} = 0, \quad j=1,2,\dots,n \quad (12)$$

这就是材料结构状态集合函数曲面应满足的偏微分方程组, 结合边界条件求解该方程, 就可以得到状态集合函数曲面的具体形式。但由于方程组为高维非线性偏微分方程组, 所以一般情况下很难求得解析形式的解, 只能借助于数值方法。

如果材料的结构弹性性能密度函数可以表达为:

$$U = \sum u_i f_i \quad (13)$$

其中, u_i 、 f_i 分别为材料结构的微结构元能量密度和材料结构配分函数。

则有,

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial}{\partial s_j} \left(\frac{\sum_{i=1}^m p_j^i A_{j,k}}{\sqrt{\det(\mathbf{J}^T \mathbf{J})}} \right) = \lambda \frac{\partial (\sum_{i=1}^m u_i f_i)}{\partial \omega_j}, \quad j=1,2,\dots,n \quad (14)$$

由式(14)可以看到, 此方程将材料结构的宏观参数和材料的微结构元参数联系起来。但在解此方程之前, 必须先确定材料结构的配分函数和材料的微结构元的弹性性能密度函数。

1.3.2 材料结构配分函数方程

结构性材料的形态非常复杂, 在两方面表现尤其突出: 一是材料的微观(细观)结构形态, 随材料种类的不同而不同, 且有时随外部条件的变化而变化; 二是就整体上讲, 材料微观(细观)结构形态的变化和构成具有随机性。因此, 解决这一问题的思路通过假定材料结构存在一个微结构元集合, 各结构状态是这一集合中的微结构元按某种分布函数组合而成, 这一函数就是材料结构配分函数。

1) 基本假定

根据对结构性材料的相关分析及概念, 通过以下假定, 建立一个反映材料结构特征的简化的材料模型:

① 在材料所有的结构状态变化中, 可以找到一个微结构元的集合, 这个集合是构成材料任一结构状态的基础, 是所有可能的结构状态下的全部的最小结构单元数量的总体;

② 材料的任何结构形态, 可以由一个关于微

结构元在空间上构成的概率密度函数所反映和描述;

③ 材料结构形态的演化遵守在某些宏观约束条件下的熵最大原理;

④ 可以通过微结构元力学特性在统计域上的均匀化得到相应的宏观参数。

后面将根据以上 4 条假定, 建立一般结构性材料的模型。

2) 材料结构模型

根据前面的基本假定, 设构成材料的微结构形态总量为 N , 各个形态的结构参数为:

$$\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_i, \dots, \mathbf{S}_N \quad (\text{这里 } \mathbf{S}_i \text{ 为矢量})$$

相应的微结构元的强度、弹性模量和几何尺度为:

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^* = \sigma_{ij}^*(\mathbf{S}_n) \\ D_{ijkl}^* = D_{ijkl}^*(\mathbf{S}_n), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3; n = 1, 2, \dots \\ L_i^* = L_i^*(\mathbf{S}_n) \end{cases} \quad (15)$$

考虑在统计域中的空间位置, 也可以表达为:

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^* = \sigma_{ij}^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_n) \\ D_{ijkl}^* = D_{ijkl}^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_n), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3; n = 1, 2, \dots \\ L_i^* = L_i^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_n) \end{cases} \quad (16)$$

这里 \mathbf{Z}_n 为空间坐标矢量, $\mathbf{Z}_n = (x_n, y_n, z_n)$ 。

并且存在一个概率密度函数:

$$f = f_0(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_n), \quad n = 1, 2, \dots \quad (17)$$

则对于考察的统计域上存在着强度、刚度和几何形态的期望值(忽略相邻排列影响, 简单均匀化):

$$\begin{cases} \sigma_{ij}^0 = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) f(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) \Delta v_m / V \\ D_{ijkl}^0 = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) f(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) \Delta v_m / V \\ l_i^0 = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) f(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) \Delta v_m / V \end{cases} \quad (18)$$

式中, σ_{ij}^0 、 D_{ij}^0 、 l_i^0 分别为统计域上的平均值。

为了将几何状态的变化能用结构变化中的组构应变 ε_{ij}^0 表达, 设概率密度函数发生一个不太大的变化, 即:

$$f = f_0(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) \longrightarrow f = f_1(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m)$$

这时就有:

$$\begin{aligned} \Delta l_i^0 &= \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^*(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) [f_1(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m) - f_0(\mathbf{Z}_n, \mathbf{S}_m)] \Delta v_m / V &= \\ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* [f_1 - f_0] \Delta v_m / V & \quad (19) \end{aligned}$$

近似的线性应变为:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^0 &= \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta l_i}{l_j} + \frac{\Delta l_j}{l_i} \right) = \\ \frac{1}{2} \left\{ \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* [f_1 - f_0] \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* [f_1 - f_0] \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right\} &= \\ \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] - \right. & \\ \left. \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] \right\} & \quad (20) \end{aligned}$$

同理:

$$\begin{aligned} \Delta \sigma_{ij} &= \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* [f_1 - f_0] \Delta v_m / V, \\ \Delta D_{ijkl} &= \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* [f_1 - f_0] \Delta v_m / V. \quad (21) \end{aligned}$$

整理后得:

$$\begin{aligned} \Delta \sigma_{ij} + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* f_0 \Delta v_m / V &= \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* f_1 \Delta v_m / V \\ \Delta D_{ijkl} + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* f_0 \Delta v_m / V &= \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* f_1 \Delta v_m / V \\ \left\{ \varepsilon_{ij} + \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] = \right. & \\ \left. \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] \right\} & \quad (22) \end{aligned}$$

整理化简, 得:

$$\begin{cases} \Delta \sigma_{ij} + \sigma_{ij}^0 = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* f_1 \Delta v_m / V \\ \Delta D_{ijkl} + D_{ijkl}^0 = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* f_1 \Delta v_m / V \\ \varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ij}^0 = \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] \end{cases} \quad (23)$$

$$\text{这里 } \varepsilon_{ij}^0 = \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right].$$

这就是当微结构元类型分布概率密度发生微小变化时, 宏观参数 σ_{ij}^0 、 D_{ijkl}^0 、 l_i 近似变化引起的增量变化 $\Delta \sigma_{ij}^0$ 、 ΔD_{ijkl}^0 、 ε_{ij} 间的关系。

根据前面的第三条假定, 材料结构状态变化相应的约束条件下, 遵守熵最大原理。将式(23)作为约束条件, 应用拉格朗日方法, 建立如下函数:

$$\begin{aligned} F &= -k \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N f \ln f + \lambda_{\sigma} \left[\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* f_1 \Delta v_m / V - \right. \\ & \quad \left. (\Delta \sigma_{ij}^0 + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* f_0 \Delta v_m / V) \right] + \\ & \quad \lambda_D \left[\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* f_1 \Delta v_m / V - \right. \\ & \quad \left. (\Delta D_{ijkl}^0 + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* f_0 \Delta v_m / V) \right] + \\ & \quad \lambda_{\varepsilon} \left\{ \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_1 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] - \right. \\ & \quad \left. \left[\varepsilon_{ij}^0 + \frac{1}{2} \left[\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right] \right] \right\} \quad (24) \end{aligned}$$

其中 λ_{σ} 、 λ_D 、 λ_{ε} 为待定常数。求此泛函数的极值,

即 $\frac{\partial F}{\partial f} = 0$, 并为了方便令 $k=1$, 有:

$$\frac{\partial F}{\partial f} = -\ln f - 1 + \lambda_{\sigma} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* \Delta v_m / V +$$

$$\lambda_D \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* \Delta v_m / V +$$

$$\frac{1}{2} \lambda_\varepsilon \left(\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right) = 0 \quad (25)$$

整理后, 得:

$$f = \exp \left\{ -1 + \lambda_\sigma \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sigma_{ij}^* \Delta v_m / V + \lambda_D \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N D_{ijkl}^* \Delta v_m / V + \frac{1}{2} \lambda_\varepsilon \left(\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right) \right\} \quad (26)$$

令:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \left(\frac{l_i^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{l_j^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \varepsilon_{ij}^* \quad (27)$$

$$\varepsilon_{ij}^* = \frac{1}{2} \left(\frac{l_i^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_j^* f_0 \Delta v_m} + \frac{l_j^* \Delta v_m}{\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N l_i^* f_0 \Delta v_m} \right) \quad (28)$$

式(26)可以简化为:

$$f = \exp \left\{ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N (\lambda_\sigma \sigma_{ij}^* + \lambda_D D_{ijkl}^* + \lambda_\varepsilon \varepsilon_{ij}^*) \Delta v_m / V - 1 \right\} \quad (29)$$

将式(29)代入式(23)中就可以确定出待定常数 λ_σ 、 λ_D 、 λ_ε 。显然他们是 σ_{ij}^* 、 D_{ijkl}^* 、 ε_{ij}^* 、 σ_{ij}^0 、 D_{ijkl}^0 、 ε_{ij}^0 、 $\Delta \sigma_{ij}$ 、 ΔD_{ijkl} 、 ε_{ij} 和 f_0 的函数, 即:

$$\begin{cases} \lambda_\sigma = \lambda_\sigma(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0, \Delta \sigma_{ij}, \Delta D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}, f_0) \\ \lambda_D = \lambda_D(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0, \Delta \sigma_{ij}, \Delta D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}, f_0) \\ \lambda_\varepsilon = \lambda_\varepsilon(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0, \Delta \sigma_{ij}, \Delta D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}, f_0) \end{cases} \quad (30)$$

如果令 $f \rightarrow f_0$, 显然应该有: $\Delta \sigma_{ij} \rightarrow 0$,

$\Delta D_{ijkl} \rightarrow 0$, $\varepsilon_{ij} \rightarrow 0$ 。这样就有:

$$f_0 = \exp \left\{ \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N [\lambda_\sigma(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0, f_0) \sigma_{ij}^* + \lambda_D(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0, f_0) D_{ijkl}^* + \lambda_\varepsilon(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0, f_0) \varepsilon_{ij}^*] \Delta v_m / V - 1 \right\} \quad (31)$$

这样就得到了在已知统计域上的材料宏观特性 σ_{ij}^0 、 D_{ijkl}^0 、 ε_{ij}^0 和微结构元特征参数 σ_{ij}^* 、 D_{ijkl}^* 、 ε_{ij}^* 的情况下, 材料微结构元的空间及类型分布的概率函数。因在 σ_{ij}^0 、 D_{ijkl}^0 、 ε_{ij}^0 中也含有 f_0 , 从式(31)可以看到这是一个关于 f_0 的函数方程。要求其显式表达式, 显然是比较困难的, 求解这一方程可以采用叠代法或递归方法求解。

如果能求解出 f_0 , 在已知微结构元的弹性密度 $u^* = u^*(Z_m, S_n)$ 的情况下, 就可得到统计域上的弹性性能密度:

$$U = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N u^*(Z_m, S_n) f(\sigma_{ij}^*, D_{ijkl}^*, \varepsilon_{ij}^*, \sigma_{ij}^0, D_{ijkl}^0, \varepsilon_{ij}^0) \Delta v_m / V \quad (32)$$

显然在这一表达式中, 不仅含有宏观参数 σ_{ij}^0 、 D_{ijkl}^0 、 ε_{ij}^0 , 同时也含有微结构元的参数 σ_{ij}^* 、 D_{ijkl}^* 、 ε_{ij}^* 。将式(32)代入式(12)中的材料结构状态集合函数的控制方程, 从理论上讲就可以求得材料结构的状态集合函数的表达式, 从而可以得到材料的整体性能。

1.3.3 微结构元分析方法

为了求解材料结构状态集合函数的控制方程, 需要材料的弹性性能密度函数, 而材料的弹性性能密度函数是由材料结构配分函数和微结构元的弹性性能密度所决定。而材料结构配分函数和微结构元的弹性性能密度函数的分析都需要进行微结构元的强度、弹性模量和微结构元的等效几何尺度的分析。所以, 微结构元的分析是结构性材料分析的基础。

1) 微结构元模型

为了简单起见, 假定材料是由大量颗粒组成(也可以是其他材料模型), 这些颗粒可以组成不同的, 甚至可能非常复杂的结构形态, 但我们总可以将其划分为一些基本结构形态(图2), 由这些基本结构形

态构成材料微结构元集合。最小的微结构元可以是两颗粒也可以是多颗粒。

一般的微结构元可以由若干颗粒组成，颗粒之间的连接称为连接体，连接体的强度或极限承载能力、变形能力可以通过一定的测定方法来确定(测定方法有待研究)。微结构元一方面由不同的几何形态相区别，另一方面由颗粒间的连接体的不同物理性能相区别。对于材料整体来讲，微结构元之间是紧密相连的，微结构元的几何形态理论上可以是二维，也可以是三维。对于二维一般三颗粒微结构元可以完全覆盖整个统计域，三维可用四颗粒微结构元覆盖整个统计域。也就是说任何二维问题都可以划分为一系列的三颗粒单元的组合体(只是单元中的颗粒角度不同)，而三维问题可以划分为由一系列的四颗粒单元的组合(有点类似于有限元方法中的三角元和四面体元)。但也可以根据材料特征，划分为其他形式，或更为复杂的微结构元组合(如颗粒链、分形结构等)。

微结构元当受到外力作用时，如果已知颗粒间的连接体的力学性能，就可以通过一般的静力学分析方法，求出微结构元在极限状态下，各颗粒节点的承载能力和位移，或者他们之间的相互关系。但一般情况下，微结构元是多颗粒节点，受到的作用力也是多作用力，当颗粒间的连接体极限承载力、弹性模量等参数已知时，整个微结构元的极限承载力问题，实际上变成类似于复杂应力下的材料强度问题。当微结构元中的某一连接体破坏时，可能存在多种外力组合方式，产生同样的结果。每种外力组合方式在由节点力构成的相空间中是一个曲面(或平面)。所以，外力组合方式构成的曲面(或平面)的内包络面就是微结构元的极限承载力曲面(可以是多个平面围合而成)。不同类型的单元，极限承载力曲面也会不同。

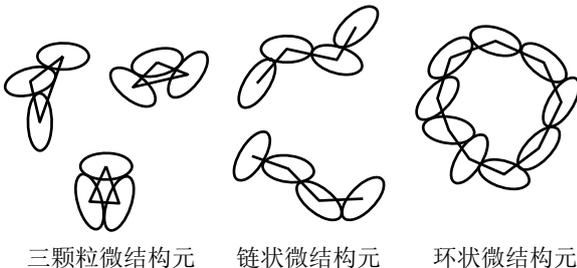


图 2 微结构元

Fig.2 Micro structure elements

2) 颗粒微结构元的等效刚度

颗粒微结构元的等效刚度可以参照文献[27]的

方法来分析。为简单起见考虑二维情况，设微结构元由若干颗粒组成，颗粒之间由连接体相连接，并设连接体为弹性。设第 i 个连接体(图 3)在局部坐标系中的刚度为：

$$\mathbf{K}_i^e = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{13} \\ k_{21} & k_{22} & k_{23} \\ k_{31} & k_{32} & k_{33} \end{bmatrix} \quad (33)$$

在整体坐标系中的刚度为： $\mathbf{K}_i = \mathbf{R}_i^T \mathbf{K}_i^e \mathbf{R}_i$ ，其中 \mathbf{R}_i 为坐标转换矩阵。

设第 i 个连接体两端的位移为： $\delta_i = [u_i^{x_1} \ v_i^{y_1} \ \theta_i^{z_1} \ u_i^{x_2} \ v_i^{y_2} \ \theta_i^{z_2}]$ ，则连接体的应变能为：

$$w_i = \frac{1}{2} \delta_i^T \mathbf{K}_i \delta_i \quad (34)$$

整个微结构元的弹性能是各个连接体弹性能的总和： $W = \sum_{i=1} w_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1} \delta_i^T \mathbf{K}_i \delta_i$ 。

微结构元对于整个统计域来讲是比较小的，因此其位移可以线性展开：

$$\delta_i = \begin{bmatrix} u_i^{x_1} \\ v_i^{y_1} \\ \theta_i^{z_1} \\ u_i^{x_2} \\ v_i^{y_2} \\ \theta_i^{z_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u + \xi_i^1 \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_i^1 \frac{\partial u}{\partial \eta} \\ v + \eta_i^1 \frac{\partial v}{\partial \eta} + \xi_i^1 \frac{\partial v}{\partial \xi} \\ \theta + \eta_i^1 \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \xi_i^1 \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \\ u + \xi_i^2 \frac{\partial u}{\partial \xi} + \eta_i^2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \\ v + \eta_i^2 \frac{\partial v}{\partial \eta} + \xi_i^2 \frac{\partial v}{\partial \xi} \\ \theta + \eta_i^2 \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \xi_i^2 \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \end{bmatrix}$$

整理后，化为：

$$\delta_i = \begin{bmatrix} u \\ v \\ \theta \\ u \\ v \\ \theta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \xi_i^1 & \eta_i^1 \\ \xi_i^2 & \eta_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \\ \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \\ \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right) \\ \left(\frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \\ \left(\frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \\ \left(\frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \end{bmatrix} \quad (35)$$

将式(35)代入应变能的表达式中, 就得到应变能与应变的关系:

$$W = \frac{1}{2A_c} (\mathbf{u}_0^T \bar{\mathbf{K}}_1 \mathbf{u}_0 + \mathbf{u}_0^T \bar{\mathbf{K}}_2 \boldsymbol{\varepsilon}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}_0^T \bar{\mathbf{K}}_3 \mathbf{u}_0 + \boldsymbol{\varepsilon}_0^T \bar{\mathbf{K}}_4 \boldsymbol{\varepsilon}_0) \quad (36)$$

其中: A_c 为统计域的几何尺度; $\mathbf{u}_0 = [u \ v \ \theta]^T$;

$$\boldsymbol{\varepsilon}_0 = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial \xi} & \frac{\partial \mathbf{u}_0}{\partial \eta} \end{bmatrix}^T; \quad \mathbf{K}_i = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{11}^i & \mathbf{K}_{12}^i \\ \mathbf{K}_{21}^i & \mathbf{K}_{22}^i \end{bmatrix};$$

$$\bar{\mathbf{K}}_1 = \sum_{i=1}^n [1 \ 1] \mathbf{K}_i \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad \bar{\mathbf{K}}_2 = \sum_{i=1}^n [1 \ 1] \mathbf{K}_i \begin{bmatrix} \xi_i^1 & \eta_i^1 \\ \xi_i^2 & \eta_i^2 \end{bmatrix};$$

$$\bar{\mathbf{K}}_3 = \sum_{i=1}^n \begin{bmatrix} \xi_i^1 & \eta_i^1 \\ \xi_i^2 & \eta_i^2 \end{bmatrix} \mathbf{K}_i [1 \ 1];$$

$$\bar{\mathbf{K}}_4 = \sum_{i=1}^n \begin{bmatrix} \xi_i^1 & \eta_i^1 \\ \xi_i^2 & \eta_i^2 \end{bmatrix} \mathbf{K}_i \begin{bmatrix} \xi_i^1 & \eta_i^1 \\ \xi_i^2 & \eta_i^2 \end{bmatrix}.$$

因此, 有:

$$\mathbf{D} = \frac{\partial^2 W}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} \partial \boldsymbol{\varepsilon}_{kl}} = \bar{\mathbf{K}}_4 \quad (37)$$

这就是由能量等效方法得到的颗粒微结构元的等效刚度。显然 \mathbf{D} 和各个颗粒间的连接体刚度有关, 也和其所在位置及方向有关。

3) 微结构元的等效强度

微结构元的另一个重要的分析内容是微结构元的等效强度分析。微结构元的等效强度分析, 是指根据微结构元所能承受的极限强度, 换算为将微结构元所占区域假想为一个连续体时的单元强度。对于颗粒模型的微结构元, 其分析的基本思路是首先根据颗粒间的连接体强度或极限承载力, 计算微结构元的极限承载力, 并建立颗粒微结构元按颗粒连接体刚度(类似杆系结构体系)形成的微结构元整体刚度矩阵。由极限承载力和微结构元的连接体刚度矩阵, 计算微结构元的各节点位移向量(也可称为极限位移), 再由极限位移向量和微结构元的等效刚度计算出相应等效应变, 由等效应变计算出相应的假想微结构元连续体的应力强度。微结构元等效刚度是根据前面按能量等法计算出的微结构元假定为连续体时的刚度。

① 颗粒型微结构元极限承载力的计算

为简单起见, 这里主要按二维颗粒构成的微结构元情况进行讨论。设微结构元存在有 m 个节点, n 个连接体, 各个节点的荷载为 F_i , 经受力分析连接体的受力为 N_1 、 Q_1 、 M_1 、 N_2 、 Q_2 、 M_2 。(这

里为简单起见, 设各连接体强度相同)

则荷载与连接体内力间存在下式:

$$[F_1^x \ F_1^y \ F_1^M \ F_2^x \ F_2^y \ F_2^M] = [\alpha_{ij}] [N_1 \ Q_1 \ M_1 \ N_2 \ Q_2 \ M_2] \quad (38)$$

这里 $[\alpha_{ij}]$ 可以认为是节点荷载与连接体内力的转换系数。当颗粒连接体是有限强度时, 他们只能在某一区间上取值。即存在:

$$\begin{cases} N_{\min} \leq N_i \leq N_{\max} \\ Q_{\min} \leq Q_i \leq Q_{\max} \\ M_{\min} \leq M_i \leq M_{\max} \end{cases} \quad (39)$$

也就是说, 式(38)右边中的各项, 可以在允许的区间中变化。但极限承载力应使左边的值尽可能大, 或者是在一个极限边界上(这十分类似于复杂应力下的强度状态)。如果假定微结构元节点的荷载与颗粒连接体的内力之间是线性关系, 各个极限荷载的边界就可以认为是一直线。因此, 只要将 N_i 、 Q_i 、 M_i 的上限作为边界点代入式(38)中, 求得各节点极限承载力的值, 这些节点力值在由节点极限荷载分量构成的相空间中就可以描绘出一系列的点, 将这些点相连所尽可能围取的最大面积的边界, 就是极限承载力的区域。

由此看到, 极限承载力曲面或区域和两个因素有关: 一是矩阵 α_{ij} , 不同的微结构元的几何形态和连接体刚度(在超静定情况下), 将得到不同的 α_{ij} 矩阵; 另一方面是颗粒间连接体的强度, 各颗粒间不同的连接体强度性能, 将影响到极限承载力区域的大小和形态。

② 微结构元连接体刚度矩阵和节点位移

设第 i 个颗粒连接体的局部坐标刚度矩阵为 \mathbf{K} , 相应的坐标转换矩阵为 \mathbf{T} , 则在整体坐标中有:

$$\mathbf{K}_i = \mathbf{T}_i^T \mathbf{K}_i^e \mathbf{T}_i \quad (40)$$

将各个颗粒连接体的刚度矩阵组装成微结构元的整体刚度矩阵:

$$\mathbf{K} = \sum_{i=1}^n \mathbf{K}_i \quad (41)$$

设节点位移为:

$$\boldsymbol{\delta} = [\delta_1 \ \delta_2 \ \cdots \ \delta_m], \quad \delta_i = [u_i \ v_i \ \theta_i]$$

节点极限荷载为:

$$\mathbf{F}_i = [F_i^x \ F_i^y \ F_i^M], \quad \mathbf{F} = [F_1 \ F_2 \ \cdots \ F_m]$$

这样就有: $\mathbf{F} = \mathbf{K} \boldsymbol{\delta}$

考虑节点位移可能存在刚体位移, 可以设某一节点位移为零, 解上述方程就得到节点位移向量。

这样得到的位移向量实际上是微结构元在荷载极限时的位移向量。

③ 微结构元的等效强度

将节点围成的区域假想为一连续区域, 根据有限元法, 在确定位移场函数后, 就可以得到一个应变转换矩阵, 或称为几何矩阵, 将节点位移转换为应变, 即:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}\boldsymbol{\delta}$$

这里 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 、 \mathbf{B} 为应变向量和几何矩阵。

则单元的应力强度为:

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{D}\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{D}\mathbf{B}^T\boldsymbol{\delta} \quad (42)$$

这里 \mathbf{D} 是微结构元等效刚度, 由式(37)确定。

通过以上过程就将节点极限承载力, 转换为假想连续体单元的强度。在这个转变过程中, 由节点的 n 个自由度变量极限承载力问题, 经过转化转变为一点的强度问题。由此可以看到, 经典强度理论可以认为是材料结构承载力极限值的一种简化的表达方式, 相当于只有一个节点的极限承载力的情况。在材料结构状态分析方法中, 节点的增多, 极限承载力的表达转变为用多维相空间中的点来表达, 但极限承载力仍然像经典强度理论中一样, 材料的强度是一个区域, 只是维度的多少不同而已。而等效分析的方法, 却类似于重整化理论方法进行了缩维变换。

4) 微结构元等效单元的几何参数

为了计算结构性材料在结构发生变化时的组构应变, 需要将不同形态的微结构元转换为等效的矩形单元, 也就是要求其各几何方向上的等效长度, 以方便其应变的分析。微结构元等效单元几何参数的分析, 是依据以下原则:

① 等体积(面积)原则。即变换前后的单元体积(面积)应不变。

② 方向等比例原则。即各方向的变换比例因子相同。

设变换后的单元几何参数为 l_x^* 、 l_y^* 、 l_z^* , 根据第一条原则, 有:

$$l_x^* l_y^* l_z^* = V \quad (43)$$

为了计算上的方便, 分别设 l_x^* 、 l_y^* 、 l_z^* 为微结构元在整体坐标方向上的几何平均值, 则存在:

$$l_x l_y l_z = \bar{V} \quad (44)$$

设: $k = V/\bar{V}$, 则 $l_x^* = l_x / \sqrt[3]{k}$, $l_y^* = l_y / \sqrt[3]{k}$, $l_z^* = l_z / \sqrt[3]{k}$ 。这样就将微结构元的等效几何长度,

转变为求微结构元在整体坐标方向上的平均几何长度。

在获得微结构元的等效刚度、等效强度和等效几何长度换算出的等效应变, 就可以确定相应的微结构元的等效能量密度。

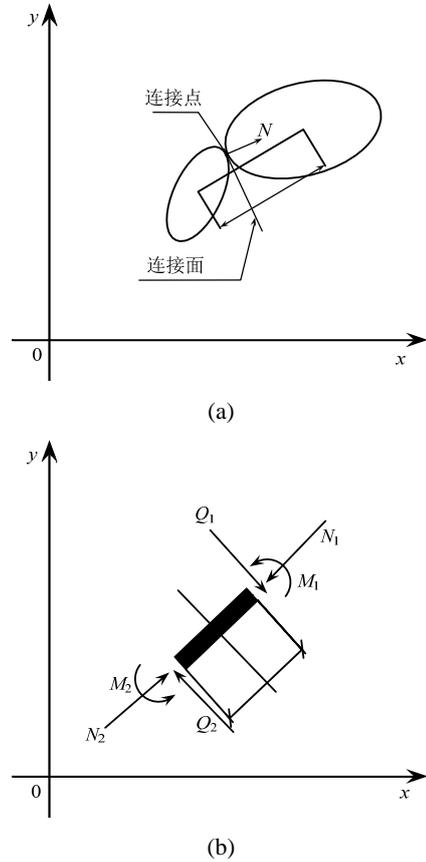


图3 颗粒间的连接体

Fig.3 Inter particle connection

2 基于材料结构状态集合分析理论的若干问题讨论

依据材料结构状态集合分析理论的思想、概念和方法, 通过对材料结构性的分析, 我们可以得到一些对材料结构性的新认识, 这使得我们有可能加深对材料结构性的理解。

2.1 关于材料结构模型

材料的结构性其实是材料的非均匀性。由于颗粒材料模型可以实现材料的充分不均匀性描述, 颗粒材料模型可以认为是表达材料结构性特征的最典型的模型之一。通过对颗粒材料模型的分析, 在以下几个方面可以加深这一认识。

1) 材料结构性的影响要素

对于颗粒性材料, 其影响要素可以很多, 但最主要的影响要素主要有三个方面: 一是颗粒的物理

特性,这是影响颗粒材料特性的基础。颗粒的物理特性包括构成颗粒的材料本身的力学特性,这就是强度、刚度(弹性模量)和变形特征;另外构成颗粒材料的化学特性在某些情况下也会影响到材料的整体性能,如材料的化学稳定性,材料的热工性能及与此有关的其他性能;二是颗粒间的连接性能,连接性能是影响材料整体性能的最重要因素之一。实际上颗粒材料的性能在很大程度上是由颗粒之间的连接性能所决定,颗粒材料与其他固体材料特性表现不同,也往往是由于这一特点所反映和影响。影响颗粒间连接性能的主要因素是颗粒间连接接触面特性,不同的接触面,其表现出来的力学特性有很大的差别。除了接触面本身的特性之外,接触面受水、汽等因素影响的稳定性,也是影响连接特性的重要因素。而接触面的特点形成与颗粒表面的特点及颗粒的几何形态有关;三是颗粒构成的组构关系。颗粒材料另一个重要特征的体现,就是颗粒可以通过各种不同的组合方式,形成各种组构,这种组构往往是影响材料整体性能另一重要因素。颗粒通过不同组合形成的组构形态,可以是一种简单形态,也可以是复杂的分形形态,这将使颗粒性材料具有一些十分特殊的性能,如材料的尺度效应等。

2) 宏观参数确定的准则与方法

颗粒材料一方面由于颗粒分布的不均匀性,使所观察区域中的各部分的材料性能有很大的差别,另一方面可以通过颗粒的不同组合形成不同的组构形态,使材料的受力特性变得更为复杂,再就是颗粒之间接触特征的不同,使颗粒之间的连接特性存在很大的差异,这些特征往往都具有随机性,使确定材料的宏观性能参数变得困难。为解决这一问题,必须根据相应的颗粒材料特点制定相应的准则与方法。

对于宏观参数,一般最为重要与力学有关的有强度、刚度和变形特征参数。这些参数由于其特性有很大的不同,所以在确定准则上也有所不同。对于颗粒材料的强度准则,文献[12]提出了在认为颗粒间的连接体的重要性等同的情况下,根据统计域中的连接体强度,可以有最小包络曲面准则、平均包络曲面准则和最大包络曲面准则。其中的平均包络曲面准则与最简单的平均强度方法比较接近。而最小包络曲面和最大包络曲面则是对于结构性材料需要考虑的准则。对于刚度(弹性模量)和变形特

征参数,目前主要以平均方法和等效方法来确定,但仔细分析颗粒材料的刚度变化和变形特征,平均方法可能并不能准确反映其真实特性。

宏观参数的求取,实际上就是一种均匀化方法。不同的均匀化方法,得到的结果可能会相差悬殊。因此,选取的均匀化方法,必须和材料的特征相接近。如材料的组构关系比较简单,采取一般的平均化方法,可以得到较好的结果。但对于分形结构这类复杂结构,则一般的平均化方法可能就会出现很大的误差,需要考虑其他的均匀化方法,重整化方法是可以考虑的方法之一。

3) 尺度效应

经典理论材料模型是无法解释材料的尺度效应的。在考虑材料结构性的颗粒材料模型中,这一问题可以得到很好的解决。

材料的宏观参数实际上是材料均匀化的结果。当采用不同的尺度进行均匀化时,对于经典理论材料模型,不同的尺度不会影响到均匀化的结果。但对于结构性材料,由于材料本身的微结构具有一定的尺度,选取的均匀化尺度与微结构的尺度之间是存在相互影响的。当选取的均匀化尺度较大时,与这一尺度相比,微结构的尺度很小时,其影响也会比较小。但当均匀化尺度与微结构尺度相比,并不是一个可以忽略的量时,微结构的影响就会比较大。特别当材料的微结构,像颗粒材料那样可能存在复杂的分形结构时,材料均匀化尺度的效应就会更加明显,文献[28]对土的分形强度进行过分析,证明当材料为分形结构时,随着均匀化尺度的减小,材料的强度会逐渐提高。其实质是材料的微结构单元越来越小,相应的材料颗粒连接强度会提高。

材料的尺度效应,在材料结构模型中可以很好地得到解释并进行分析。而对一般性材料,其结构性具有普遍性,所以材料尺度效应也就具有普遍性。材料的尺度效应与材料的结构性的强弱有着直接关系,材料的结构性越强,则材料的尺度效应也会越明显。而接近均匀的材料,其尺度效应也会较弱。

2.2 材料结构状态集合函数意义下的强度、流体力学法则和应力-应变关系

材料结构状态集合分析理论的核心是材料结构状态集合函数。根据材料结构状态集合分析理论的观点,材料结构状态集合函数反映了结构性材料

的整体特性，下面针对这一点进行讨论。

1) 材料结构强度

设材料结构状态集合函数的表达式为如下形式：

$$\Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}) = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (45)$$

如果设 D_{ijkl} 、 ε_{ij} 为常量，则式(45)变为：

$$\Phi(\sigma_{ij}) = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3$$

这实际上就是复杂应力条件下的强度方程或强度准则。

由此看到，材料结构状态集合函数可以看作是以 D_{ijkl} 、 ε_{ij} 为参数的材料强度方程或强度准则。随着 D_{ijkl} 、 ε_{ij} 的变化，强度曲面也将发生变化，在应力空间中形成了一个在不同参数下变化曲面的包络曲面，经典的强度曲面实际上就是这一曲面。如果用应力-弹性模量-应变(组构)构成的多维相空间来描述，就形成在这一多维空间中的曲面。由此可以看到，从某一侧面上讲，采用多维空间更能合理地材料的强度进行描述。

2) 状态路径方程

设在外部荷载作用下，存在下列状态路径方程：

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = \sigma_{ij}(t) \\ D_{ijkl} = D_{ijkl}(t), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(t) \end{cases} \quad (46)$$

这里 t 为参数(不是时间)。

在一般情况下，结构状态变化的路径应满足能量最小原理，并且变化应位于状态集合函数曲面之上，即存在泛函：

$$\Gamma = \int_s \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + \lambda \Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (47)$$

这里 λ 为待定常数。式(47)考虑参数形式，有：

$$\Gamma = \int_s \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} dt + \lambda \Phi(\sigma_{ij}(t), D_{ijkl}(t), \varepsilon_{ij}(t)), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (48)$$

因此，有欧拉方程：

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_{ij} + \lambda \frac{\partial \Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij})}{\partial \sigma_{ij}} = 0 \\ \dot{\sigma}_{ij} - \lambda \frac{\partial \Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij})}{\partial \varepsilon_{ij}} = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ \frac{\partial \Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij})}{\partial D_{ijkl}} = 0 \end{cases} \quad (49)$$

这就是材料结构状态路径应满足的方程组。与一般微分方程的求解同样道理，方程的解除了要满足状态路径方程外，还要满足相应的初始条件。

3) 应力-应变关系

求过一点的状态路径的切线方程有：

$$\frac{\sigma_{ij} - \sigma_{ij}^0}{\dot{\sigma}_{ij}} = \frac{D_{ijkl} - D_{ijkl}^0}{\dot{D}_{ijkl}} = \frac{\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0}{\dot{\varepsilon}_{ij}} = k, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (50)$$

令：

$$\begin{cases} d\sigma_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{ij}^0 \\ dD_{ijkl} = D_{ijkl} - D_{ijkl}^0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ d\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0 \end{cases} \quad (51)$$

结合式(50)，得：

$$\begin{cases} d\sigma_{ij} = k \dot{\sigma}_{ij} \\ dD_{ijkl} = k \dot{D}_{ijkl}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \\ d\varepsilon_{ij} = k \dot{\varepsilon}_{ij} \end{cases} \quad (52)$$

考虑式(49)和式(50)，有：

$$\begin{cases} d\sigma_{ij} = k \lambda \frac{\partial \Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij})}{\partial \varepsilon_{ij}} \\ d\varepsilon_{ij} = -k \lambda \frac{\partial \Phi(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij})}{\partial \sigma_{ij}}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (53)$$

这里可以看到非常类似于经典理论中用塑性势函数表达的应力和应变增量的表达式，也就是经典理论中的流动法则。

从式(53)中可以看到未知量除了 $d\sigma_{ij}$ 和 $d\varepsilon_{ij}$ 外，还有 $(k\lambda)$ ，方程的数量与未知数的数量相比，少一个。因此，另外考虑状态集合函数的切面方程：

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} + \frac{\partial \Phi}{\partial D_{ijkl}} dD_{ijkl} + \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}} d\varepsilon_{ij} = 0 \quad (54)$$

式(53)和式(54)结合，就可以求得所有的强度和结构应变的增量。对于结构状态变化沿路径的增量

关系有：

$$d\sigma_{ij} = - \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}} / \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} d\varepsilon_{ij}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (55)$$

如果考虑材料的弹性应变，则全应变为：

$$d\bar{\varepsilon}_{ij} = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3$$

又：

$$d\sigma_{ij} = D_{ijkl} d\varepsilon_{ij}^e = D_{ijkl} (d\bar{\varepsilon}_{ij} - d\varepsilon_{ij}) =$$

$$D_{ijkl}d\bar{\varepsilon}_{ij} + k\lambda D_{ijkl} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (56)$$

这里 $d\bar{\varepsilon}_{ij}$ 、 $d\varepsilon_{ij}^e$ 分别为材料的全应变和弹性应变。将式(54)代入式(56)中, 有:

$$k\lambda = \frac{\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} D_{ijkl} d\bar{\varepsilon}_{ij} + \frac{\partial \Phi}{\partial D_{ijkl}} dD_{ijkl}}{\frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} - \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} D_{ijkl} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{kl}}}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (57)$$

又将式(56)代入式(54), 有:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial D_{ijkl}} dD_{ijkl} = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3$$

代入式(57)中, 全应力-应变关系:

$$d\sigma_{ij} = \left[D_{ijkl} - \frac{D_{ijkl} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{kl}} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{mn}} D_{mnkl}}{\frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{kl}} - \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{ij}} D_{ijkl} \frac{\partial \Phi}{\partial \sigma_{kl}}} \right] d\bar{\varepsilon}_{ij}, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (58)$$

这就是全应变下的材料本构关系。

材料结构状态集合函数方程、状态路径方程和应力-应变关系构成了复杂结构性材料状态集合分析理论的核心部分。这一方法和理论是建立在材料结构概念基础上, 通过对材料结构变化应遵守的规则而导出了整个理论体系。这一体系反映了结构性的复杂材料具有的宏观规律, 通过对这一规律的掌握, 可以对复杂的结构材料进行分析, 从而了解其特征和特性。

2.3 关于材料结构配分函数方程的讨论

材料结构配分函数方程是描述材料结构特征的参数, 这一参数将材料的宏观与微结构之间建立起了联系。这实际上是物理学中经常用到的方法。宏观与微观的联系桥梁往往是统计学方法。材料结构配分函数正是这一方法的具体体现。由于材料结构配分函数方程不是一般意义上的方程, 是一函数方程, 具有明显的非线性特征。考虑到材料结构配分函数在材料结构状态集合分析理论中具有十分重要的作用, 所以, 下面对其一些特征进行讨论。

1) 材料结构配分函数的参数类型

如果式(31)有解, 则方程可表示为:

$$f = f(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}, L_{ij}^0, \sigma_{ij}^*(S), D_{ijkl}^*(S), L_{ij}^*(S)), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (59)$$

其中包含的参数可以分为两种类型: 一种是宏观参

数, 一种是微结构参数。宏观参数 σ_{ij} 、 D_{ijkl} 、 ε_{ij} 、 L_{ij}^0 表达了材料的宏观状态, 也就是不同的宏观状态下, 将得到不同的配分函数的表达式。而微结构参数 $\sigma_{ij}^*(S)$ 、 $D_{ijkl}^*(S)$ 、 $L_{ij}^*(S)$ 表达的是当 S 为某特定值时, 其实质是某一类型微结构元时的强度、弹性模量和几何参数。也就是说微结构元的特性和微结构元集合特征将影响到配分函数的值。

分析微结构元参数, 可以发现这一参数可能会有三种类型:

第 1 类为当微结构元参数具有某种特殊形式时, 如不随 S 参数的变化而变化, 这时 $\sigma_{ij}^*(S)$ 、 $D_{ijkl}^*(S)$ 、 $L_{ij}^*(S)$ 变为常量, 这时配分函数实际上只和宏观参数相关, 而与微结构参数无关:

$$f = f(\sigma_{ij}, D_{ijkl}, \varepsilon_{ij}, L_{ij}^0), \quad i, j, k, l = 1, 2, 3 \quad (60)$$

由此代入状态集合函数控制方程中, 得到的状态集合函数的参数, 也必然只包含有宏观参数。这类配分函数可以称其为齐次类型的配分函数。这实际上, 表达的是材料为均匀材料, 也就是材料不存在结构性, 问题退化为经典理论中的弹塑性材料模型。

第 2 类是在微结构参数中, 包含有静态的微结构参数, 如颗粒的物理参数和几何形态参数, 不随结构形态的变化而变化。如果在材料结构配分函数中, 只含有静态的微结构参数, 而不含有动态的微结构参数, 由此代入材料结构状态集合函数控制方程中, 得到的状态集合函数的解将只含有宏观参数和静态的微结构参数。也就是说组成材料的某些固定颗粒特性参数将决定材料的整体性能。

第 3 类是材料结构配分函数中, 即含有宏观参数, 也含有静态和动态的微结构参数。这样的配分函数求得的材料结构状态集合函数, 将包括了宏观与微结构的所有参数。这将反映材料的更为复杂的材料性能。

2) 材料结构配分函数的存在性与临界状态

根据式(31), 材料配分函数可能有多种解的可能性: 一种是无解。这说明在此宏观和微结构状态下, 实际的结构状态不可能出现; 第二种是存在通解。这时材料可能存在多种结构形态, 具体是哪一种形态, 要根据初始条件决定; 第三种可能存在特解。但特解是否是真实状态的解要进行分析。

进一步分析方程的形式, 材料结构配分函数方程可以表达为如下简化的形式:

$$f = R(f) \quad (61)$$

实际上是关于 f 的函数方程, 可用叠代法进行求解。由不动点理论可知, f 相当于 R 的不动点。根据不动点理论, 不动点可以分为稳定不动点和不稳定不动点。

利用线性重整化方法, 将 $f' = R(f^*)$ 在不动点 f^* 附近展开, 只保留线性项, 则有:

$$f' = R(f) = f^* + \left. \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right|_{f^*} \delta f \quad (62)$$

同时有, $f' = f^* + \delta f'$, 对比两式可得:

$$\delta f' = \left. \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right|_{f^*} \delta f \quad (63)$$

显然当 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| < 1$ 时, $\delta f' \rightarrow 0$, 随叠代步数

的增加, 其解 f 将逼近 f^* ; 当 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| > 1$ 时,

$\delta f' \rightarrow \infty$, 随叠代步数的增加, 其解 f 将远离 f^* 。

也就是说对于 f^* 点, 如果在该点 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| > 1$, 这个

点是一个不稳定点, $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| < 1$ 时是一个稳定点。

根据重整化理论, 不稳定的不动点一般是物理状态的相变点或临界点。对于结构性材料来讲, 可以推断, 不稳定点是结构状态是否存在的临界点。

因此, $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right|$ 值可以作为判断结构临界点的依据。

根据 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right|$ 的变化可能会有三种情况: 一是随宏

观和微结构参数的变化, 恒有 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| < 1$, 则材料

结构状态恒存在; 二是恒 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| > 1$, 说明这时材

料不可能存在某种结构状态; 三是在宏观或微结构参数的某一部分, 存在 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| < 1$, 而在另一部分

$\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| > 1$, 说明材料只在某些情况下, 存在相应

的结构状态。这时根据宏观或微结构参数的变化, 应该存在一个界面。在界面的一侧结构状态稳定地存在, 在另一侧则不存在相应的结构状态。这

个界面就是结构状态的分界面。在宏观参数相空间中, 如果令 $\left| \frac{\partial R(f)}{\partial f} \right| = 1$, 并考虑两侧的情况, 可

以得一个关于 σ_{ij} 、 D_{ijkl} 、 ε_{ij}^f 的函数面, 这个面可以认为是材料结构状态集合函数的边界, 相当于给定的状态集合函数的定义域。

3) 关于结构性材料的密度变化

剪胀是结构性材料的重要特征。根据材料结构配分函数确定的材料结构状态, 可以很好地解释材料的剪胀问题。

设在小应变情况下, 假定体积应变为:

$$\varepsilon_v = \varepsilon_{11}^f + \varepsilon_{22}^f + \varepsilon_{33}^f = \frac{\sum \sum l_1^*(f - f_0)}{\sum \sum l_1^* f_0} + \frac{\sum \sum l_2^*(f - f_0)}{\sum \sum l_2^* f_0} + \frac{\sum \sum l_3^*(f - f_0)}{\sum \sum l_3^* f_0} \quad (64)$$

材料是剪胀还是剪缩主要由 ε_v 是大于零, 还是小于零来决定。其中主要的影响是 l_i^* 、 f 的变化特征。由图 4 所示。

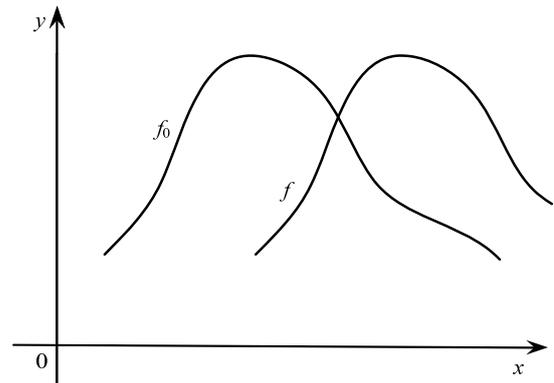


图 4 配分函数与材料的剪胀

Fig.4 Distribution function and material shear up

由图 4 可以看到, f 和 f_0 相比, 其值一定会在某个区间 $f - f_0 > 0$, 而在另一区间 $f - f_0 < 0$, 并同时考虑 l_i^* 的变化, 很可能在某一区间一般情况 ε_v 是大于零, 而另一区间则相反。如果考虑材料的微结构形态为均匀分布, 这时 l_i^* 为常数, 则必然有 $\varepsilon_v = 0$ 。也就是说均匀材料或无结构特征的材料, 其体积应变一般为零, 经典材料正是符合这一特征。

如果 $\varepsilon_v = 0$, 是由剪胀向剪缩(相反)变化的拐点, 如果设:

$$V = \sum \sum l_1^* l_2^* l_3^* f \quad (65)$$

则 V 是材料结构宏观参数的函数, 因此有:

$$\frac{\partial V}{\partial \sigma_{ij}} = 0, \frac{\partial V}{\partial D_{ijkl}} = 0, \frac{\partial V}{\partial \varepsilon_{ij}} = 0 \quad (66)$$

解式(66), 可以得到体积变化的一个极值点。这个极值点可能是材料的最大体积(最小密度), 也可能是最小体积(最大密度), 也可能是一个拐点。为了进行判断可以求其二级导数。如果各二级导数均大于零, 同时考虑一级导数为零, 则该点为最小体积, 即最大密度。其他情况类推。当二级导数中, 部分大于零, 部分小于零, 且有等于零, 则该点在几何上为鞍点, 也就是体积(或密度)变化的转折点。

$$\frac{\partial^2 V}{\partial \sigma_{ij}^2} > 0, \frac{\partial^2 V}{\partial D_{ijkl}^2} = 0, \frac{\partial^2 V}{\partial \varepsilon_{ij}^2} = 0 \quad (67)$$

由此看到, 结构性材料的密度变化特征相比于经典均匀材料要复杂的多。

2.4 由材料微结构元分析得到的一些新概念

作为结构性材料分析基础的微结构元分析方法, 是从材料结构的状态集合的思想出发, 充分考虑了结构性材料的特征, 特别是对于颗粒材料模型, 导出的具体分析。更反映出结构性材料所具有的新特征, 由此而引出了一些新的思想和概念。

1) 由颗粒结构元方法引出的广义强度概念

在经典弹塑性理论中, 强度理论是其重要基础。由于经典弹塑性理论所研究的材料模型是建立在连续、均匀、各向同性和无限可分的基础上, 所以材料的强度可以指的是一点的强度。而一点的强度主要以应力的方式来描述。而对非连续的颗粒性材料, 用点来描述材料的强度是有一定的困难的。当描述的尺度接近和小于材料的构成单元颗粒时, 这种描述方法往往失去其效用。为此人们不得不引进各种均匀化方法。颗粒结构元方法也是一种均匀化方法, 是通过在单元上的能量等效方式来得到材料的强度。这种分析的思路与过去的方法相比并没有大的变化, 关键在于这一分析过程给了我们对于强度问题的新认识。

通过分析过程可以发现, 具有若干节点的颗粒结构元的极限承载力, 反映的是具有一定的结构形式、一定的几何形态和一定的连接特性构成的结构体承载能力的极限状态。随颗粒结构元节点数量的不同, 其承载能力极限状态的表达方式变得越来越复杂。如果用节点上力的数量作为维度, 则其维度的数量与节点的数量有关。也就是节点数量越多, 维度就越大, 表达的方式也越复杂。但我们如果用

节点维度表达的空间来描述颗粒结构元的极限承载力, 则每一种极限状态都是这个多维相空间中的一。考虑到颗粒间连接强度或极限连接力的限制, 在一个多节点的复杂结构中, 极限承载能力的状态将构成一系列的曲面, 在有些情况下可能构成闭合的曲面。在这一点上非常类似于经典弹塑性理论中的强度理论的描述方法。但其中的区别是维度数量的不同。所以, 由此导出的材料结构的极限承载力如果转化为用应力强度来表达, 是一种意义更为广泛的强度理论。因此, 可以称这种建立在材料结构元上的强度, 为广义强度。随广义强度维度的降低, 当其极限状态为一点时, 就是经典弹塑性理论的强度理论概念。

2) 广义强度到经典强度的分析方法——重整化

在微结构层面上, 可以认为材料是以大量的颗粒或其他基本单元所组成, 这些颗粒或单元的不同形态、连接方式和连接特性构成材料的微结构形态。而微结构形态又影响到材料的宏观性能。在微结构层面上, 无论是颗粒或基本单元的数量都是大量的, 或者说其是多自由度的, 描述其特性的方法, 只能是多自由度, 即多维的相空间中进行。

广义强度与经典强度理论的最本质区别是描述的对象不同。广义强度描述的是复杂结构多维情况下的材料结构强度, 而经典强度理论描述的是点的材料强度。而宏观分析从某种意义上讲, 还是要把问题简化为连续状态, 因此, 材料的强度也需要从广义强度过渡到经典强度。而广义强度是多维方式下的强度, 要简化为点方式下的强度, 就必须对多维方式进行处理。在物理学理论中认为, 多维的实质是多自由度问题, 减少维数, 相当于减少自由度。而处理这类问题最有效的工具就是重整化理论。所以, 颗粒结构元方法或微结构元方法, 其实质是一种降维处理的重整化方法。显然这种方法不同于传统物理理论中的重整化方法, 他是专门用于处理结构性材料中的微结构元强度的方法, 但其核心思想仍然是物理理论中的重整化思想。所以, 从某种意义上讲, 颗粒结构元或微结构元的分析方法, 是重整化理论在结构性材料中的具体应用。

3) 关于微结构元集合

微结构元分析方法的重要组成部分是微结构元集合的选取。不同材料的特征是通过微结构元的集合来体现, 因此微结构元集合选择, 类似于材料模型的选取, 或至少是对材料模型的确定有着重要

的影响。从材料结构状态集合分析理论的整个分析过程中可以看到, 状态集合函数的控制方程、材料结构配分函数方程都是按照一定的方法和规则进行求解的过程, 而只有微结构元集合是需要根据材料的特征进行选取。所以, 材料微结构元集合是决定整个材料模型是否合理的关键。不同的结构材料, 其宏观表现出的结构特征是不一样的, 这都需要通过选取合适的微结构元集合来表达和描述。

微结构元集合的确定需要通过材料的宏观特征与微观特性的观察和总结, 可能的情况下可以通过一定的实验手段来进行。通过对已有大量文献的考察, 目前对材料的结构性影响, 认识比较深刻的比较典型的微结构元有链状结构、环状结构和分形结构。因此, 某些材料的微结构元集合可以以这类结构为主体进行分析^[9,12]。而实际的材料结构可能会更为复杂, 可以考虑是几种典型微结构元的组合形成的集合。材料结构的状态可能是在几种典型结构中过渡和变化, 如分形结构可能在自然状态下形成, 但当材料受到扰动后, 分形结构可能会受到破坏, 而向环状或链状结构变化。对于非颗粒材料模型, 可能还会有其他类型的微结构元出现。

从理论上讲, 材料结构状态集合分析理论中微结构元集合选取的灵活性, 增加了这一理论对复杂的结构性材料的不同形态的适应性。结构性材料的复杂性是经典弹塑性材料所不可比拟的, 因此描述结构性材料的理论也应远比经典弹塑性理论要复杂的多。所以, 材料结构状态集合分析理论不仅仅包含状态集合函数控制方程以及材料结构配分函数方程, 而且更为重要的是为适应各种结构性材料的特征, 形成的微结构元的分析方法。微结构元分析方法中的微结构元集合, 就像有限元方法中的单元类型, 是适应于不同的材料结构问题。但微结构元的集合要比的有限元方法的单元类型要复杂的多, 在针对问题选取时也要困难的多。

根据材料结构状态集合分析理论的方法, 对结构性材料的分析, 得到了一些新的结论, 提供了一些新认识。但仍然有许多方面, 还需要进一步的深入研究和挖掘, 才能使对材料的结构性本质有更加深入的理解。

3 需要进一步研究的问题

目前对材料结构状态集合分析理论的研究工作还是初步的, 只是提出了一个解决材料结构性问

题的粗略框架, 无论在理论方面, 还是实验方面及应用方面, 还有许多问题需要深入和细致的研究。

3.1 理论探索

理论研究与探索结构性材料的特定规律, 是解决这一问题的重要前提。材料结构状态集合分析理论虽然已初步确立了一个理论框架, 但有许多方面需要深入研究。

1) 颗粒模型下材料结构状态集合分析理论体系的深入和完善

材料结构状态集合分析理论的核心内容是材料结构状态集合函数问题。特别是对状态集合函数的存在性问题, 更是这一问题的核心和关键。从理论上证明, 对于结构性材料应该或必然存在这样一个描述材料结构性特征的函数, 将对材料结构状态集合分析理论的发展具有重要的意义, 也是这一理论能够继续发展和存在的基础。理论上研究状态集合函数的存在性问题是核心问题或一个不可回避的问题。

材料结构状态集合分析理论目前研究较为深入的是针对颗粒模型体系, 这方面的研究虽然得到了一些有意义的结果, 但研究的细致程度还远远不够。如颗粒模型下的材料结构状态集合函数的一般具体表达形式, 状态集合函数的几何特征和形态特征, 影响状态集合函数的主要因素等。作为反映结构性材料整体特征和性能的状态集合函数, 在颗粒模型这一特定条件下, 其形态特征应具有反映颗粒材料特点的特性, 深入和细致研究颗粒模型下的材料结构状态集合函数的特征、特点、形态变化规律, 有益于掌握颗粒这种具有强结构性材料的规律。特别是研究颗粒材料状态集合函数的一般性、局部和整体的形态特征是今后需要认真研究的重要问题之一。另外, 状态集合函数代表了材料的整体性能, 因此状态集合函数的意义及应用也需要进一步的发掘。

材料结构配分函数在材料结构状态集合分析理论中有着重要地位, 从理论上研究这一函数存在的条件, 对于深入了解结构性材料的性质, 以及微结构对材料宏观参数的影响是非常重要的。状态集合函数存在的条件, 其实质就是结构性材料的结构存在的条件和状态, 所以掌握这方面的规律和特点, 就是掌握材料的形态规律。另处, 影响材料结构配分函数的因素和条件, 是深入掌握配分函数特征的又一个重要方面。也是在分析中形成配分函数

约束条件的重要内容。约束因素和条件可以分为两个大的方面：一方面是宏观影响因素和约束，另一方面是微结构的影响。再就是，配分函数由一般正常形态向非正常形态转化，或配分函数由正常形态向无意义形态转化的条件。这其中最重要的条件就是能引起配分函数突变的条件。在物理学中，突变状态往往是材料相变点，因此结构性材料的配分函数突变点，有可能存在类似的相变点(如阻塞现象)，搞清楚这一问题，对于深入了解结构性材料的性质具有重要意义。

另外一个方面是一般材料微结构元集合问题的研究，也是材料结构状态集合分析理论体系的重要方面。这方面主要需要进一步的掌握材料结构微结构元集合的一般特征和规律，微结构元集合的描述方法和分析方法。对于不同类型的材料，特别是颗粒材料，微结构元集合抽取、形成、分析是整个理论体系的重要基础内容。目前对于一般性材料，在这方面的认识还是非常模糊或不清晰的，加深这方面的研究是非常必要的。

2) 针对不同类型颗粒、连接特征、组构形态具体问题的研究

应用材料结构状态集合分析理论，目前仅对一般概念下的问题进行了初步的研究，但对于具有某种具体材料特征的问题的研究还进行的不多。所以，这方面的研究是今后的一个研究重点方向。

对于颗粒材料，颗粒的形态是影响颗粒材料性能的一个重要方面，有时甚至是决定性的方面。应用材料结构状态集合分析理论，深入和分门别类地研究不同形态的颗粒所构成的材料的力学性能，对于丰富这一理论来讲，是一个重要方向和思路。材料结构状态集合分析理论提供了系统的整体的思路和研究方法，但对于颗粒材料本身具有的具体问题还需要具体的有针对性的解决方法。如颗粒形态的简化、颗粒间接触方式和性能的确等，都需要深入分析和研究。

材料颗粒之间的连接特征是影响材料性能的重要因素。对于颗粒间的连接性能在过去有不少学者做过方面的工作，应用材料结构状态集合分析理论分析问题，一方面可以应用已有的研究成果，另一方面要考虑构成材料的颗粒形态所带来的颗粒间连接性能的变化。颗粒间连接性能的复杂性不仅仅在于单个颗粒间的连接形态的变化，从整个材料的宏观方面看，材料结构的变化以及材料的宏观

参数的影响也会对颗粒间的连接性能产生影响，对于这方面的问题，目前的认识还是非常粗浅的，还有大量的工作需要去做。

材料微结构元集合目前还是一个非常复杂的问题。为了问题的简化，可以针对某些特定的常见的微结构元集合形态材料模型进行研究。对于颗粒材料模型，可以首先对如链结构集合、环结构集合和分形结构集合进行研究，在此研究的基础上可以对这几类微结构元的混合集合问题进行研究。

3) 研究区畴模型和节理模型

材料的结构性具有普遍性，颗粒材料是研究的比较多的一种结构性材料，但对于其他类型的结构性材料也是需要认真研究的，如区畴模型材料和节理模型材料。对于区畴模型，更多的是用来描述连续性较好，但均匀性较差的材料。而节理模型可以用来描述如岩石这类具有丰富节理的材料。采用材料结构状态集合分析理论和方法研究这方面的问题给我们提供了一种新的思路和研究方法。

3.2 数值分析

材料结构状态集合函数的控制方程和配分函数方程均为非线性方程，微结构元的分析也相对繁杂，有时还会相当困难，这都使问题的分析很难只限于采用解析方法。因此，数值方法是解决这些困难问题的一种重要手段。特别是和计算机结合，数值分析及模拟在有些情况下，成为必要和唯一的可行手段。

1) 方程数值求解

材料结构状态集合函数控制方程是一组非线性的偏微分方程。尽管有许多问题都可归结采用非线性偏微分方程来描述，经过许多学者的努力，发展出了反散射法、齐次平衡法、函数变换法，以及多指数函数法和有理函数变换法等，也获得了许多经典非线性偏微分方程的解析解法，解决了不少工程问题，但一般非线性偏微分方程的求解却一直是相当困难的问题。在数值解法上，人们通过采用差分法、小波算法和其他一些优化算法，用于非线性偏微分方程的求解，但仍然有些问题没有解决，如收敛问题、效率问题等。所以，对于本文导出的材料结构状态集合函数的控制方程，就是在数值分析领域，也是一个新问题，需要针对这一组非线性的偏微分方程探讨其解决方法。

对于材料结构配分函数，解决这一问题的难度可能就更为大一些。因为，对于函数方程的解法，

虽然有着很长的历史,函数方程理论也有很大的发展,如一些学者提出 Cauchy 法、待定函数法、不动点法等,以及其他一些函数方程的解法,但往往只对某一类的函数方程有效,目前还没有一种通用的解法,在数值解法研究方面,这方面的研究还有许多工作要做。下一步的重要工作是针对材料结构配分函数方程,特别是在各参数(包括宏观参数和微结构元参数)变化的情况下配分函数方程的解法的研究。

微结构元的分析是材料结构分析的重要基础性工作,由于微结构元的多样性,微结构元的数值分析方法将是不可或缺的重要方面。这方面分析的难度虽然不是很大,没有不可突破的难点,但颗粒之间的连接特性与关系的复杂性,对于微结构元特性的精确分析是一个挑战,特别是对大量颗粒间的连接,且连接特性存在差异时,可能还要引入统计方法来解决这方面的问题。总之,对于微结构元的分析还有许多细致的工作要做。

2) DEM 模拟

材料结构状态集合分析理论方法,目前一方面需要在理论上的进一步分析和论证,另一方面可以通过最接近于材料结构分析模型的离散元模型方法进行模拟分析,以通过数值方法验证材料结构状态集合函数方法的正确性和可应用性。离散元 DEM 方法的基本思想是把不连续体划分为一系列的单元体,各个单元体之间可以按力学关系相互作用,由此形成的材料的作用关系,从某种意义上讲,必然带有结构性材料的特征。因此,采用离散元 DEM 方法模拟结构性材料的特征,分析其规律性,验证材料结构状态集合分析理论提出的状态集合函数的存在性及其函数特征,具有天然的合理性。利用离散元 DEM 方法,可以很好地模拟颗粒材料结构的随机特征,并利用这种随机特征分析其形成的随机结构的特性。通过这些特征和特性的分析,可以与材料结构状态集合分析理论提出的材料结构的状态集合函数和构成特性进行对比分析,以证实和了解分析的结果的正确性。

采用离散元 DEM 分析,最重要的是要确定一个合理的结构性材料模型。颗粒材料模型是一种典型的结构性材料模型,而颗粒特征正是离散元 DEM 方法的基本要求,在这种模型下,可以利用离散元 DEM 方法分析其结构特性:这包括材料的强度特性,许多学者在这方面做过工作,都取得了不错的

结果;另外可以对材料的结构刚度和变形特征进行分析,以获得材料的结构特性。也就是说用这一方法,可以很好地从另一个角度模拟材料结构特征的变化规律。对于材料结构状态集合分析理论,虽然这种模拟分析并不是必须的,但在这一理论的发展过程中,需要从不同的角度去验证理论分析的结果和结论,因此,在数值分析方面,模拟分析对于应用于材料结构状态集合分析理论分析具体问题时,是一种重要的手段和方法。通过这一方法的应用,也可以从某些方面促进材料结构状态集合分析理论的发展。

离散元 DEM 方法已提出有数十年了,与其他方法相比有其自然的优势,特别是在非连续材料的分析方面,是许多其他方法所不具备的。但不可否认,这一方面还有许多方面需要改进和研究,特别是对于颗粒性材料模型方面,主要表现在以下几个方面:一是颗粒的形态参数问题。实际中的颗粒形态是十分复杂的,如何抽象出具有本质特征的颗粒形态参数是提高这一方法分析精度的重要内容;另一方面是颗粒间的力学关系模型的建立。结构性材料的性能,影响非常显著的一个重要方面就是颗粒间的力学关系。实际颗粒间的力学特性是非常难以准确把握的,采用什么样的模型来更合理地描述,是需要进一步解决的一个重要问题。再就是颗粒间的组构关系的生成,目前在这一方面还掌握的很少。

3.3 实验验证与检测

实验检验永远是一切理论的最后试金石。材料结构状态集合分析理论的正确性与否也有待于实验的验证。除了理论总体性的验证性实验外,对于需要支撑这一理论的反映材料结构的基础参数,也需要在这一理论的指导下,设计一系列的新的实验和检测方法。

1) 材料结构状态集合函数验证性实验

材料结构状态集合分析理论的核心内容之一是材料结构状态集合函数的存在性,这一问题可以从理论上解决,但更重要的是通过实验的验证来确认。由于结构性材料的研究在这方面的的工作才刚刚开始,实验性的研究工作还没有进行,在今后的工作中需要根据理论研究的进展,通过实验来加以验证。理论是这一工作的指导,但实验也是不可或缺的重要部分。由于结构性材料的复杂性,过去大量的实验还是一种探索性性质的工作,目前可以在理论的指引下,进行验证性的实验工作。

由于结构性材料的复杂性,材料结构状态集合函数的实验验证性工作是一个复杂且难度较大的工作。如对于颗粒性材料,在保持特定结构状态的情况下,如何测定其强度和弹性模量目前来讲还是需要认真研究的。颗粒材料的结构各部分的稳定性,一般情况下是极不均匀的,受到外界的扰动时,某些部分极易发生变化,从而使需要测定的结构状态已不复存在,这种情况下,更无法测定原结构状态下的强度和弹性模量。如何在保持结构状态稳定的情况下,又能测定出其强度和弹性模量参数,需要根据颗粒材料的结构特征,设计出可行的实验方案。除了这一难点之外,材料三维状态下的实验检测也是一个难点。在三维情况下,材料结构的宏观强度应该至少有6个独立的参数,而材料的弹性模量可能有36个独立参数,如此大量的参数的测定是一个相当困难的问题。

2) 颗粒形态、颗粒间的连接性能、颗粒组构关系检测实验

颗粒材料的性能在很大程度上受到颗粒形态、颗粒间的连接性能和颗粒组构关系的影响。在理论分析中,颗粒形态、颗粒间的连接性能和颗粒组构关系都通过一定的方式假定而确定,而实际颗粒材料中的这些参数的情况,需要通过具体的实验来检测得到。到目前为止,一些学者已在这方面作了一些探索,取得了一些成果。如颗粒形态的分布,岩土材料中的空隙的分布等。但材料结构状态集合分析理论对这些参数的要求,还需要进一步的细致化,这方面比较全面的工作还比较少,如颗粒间的连接性能的实验等,还需要加强这方面的工作。

颗粒形态的检测实验,是进行的比较多的实验,取得的成果也相对比较多。到目前为止,对颗粒形态的检测得到的结论主要有,颗粒的表面分布,具有分形的性质,颗粒的大小分布随材料的不同而不同。今后在这方面的工作可能需要针对不同的材料类型,通过检测和统计归类,建立材料类型与颗粒形态分布的关系,并形成相应的数据库,实现以颗粒形态分布为参数的颗粒材料分类系统。一方面为理论分布奠定参数数据基础,另外一方面也为工程实际的应用服务。

颗粒间连接性能的检测实验,到目前为止是相对比较困难的。对于大小不一的颗粒,颗粒间的作用关系十分复杂,受到很多因素的影响,另外颗粒的尺度也是实验检测困难的因素之一,过去对这方

面的研究也比较少。所以,对于颗粒间连接性能的实验检测需要新的能够反映颗粒间作用的实验方法和实验设计。随颗粒的尺度的变化,颗粒间的连接作用力也是不一样的,较大的颗粒间的作用主要是以机械作用力为主,而随着颗粒尺度的减小,一些化学键的作用开始显现,特别当存在水等液体时,颗粒间的相互作用更为复杂。因此,实验的方法需要研究和探索。

颗粒组构关系的检测,是了解颗粒材料结构的重要内容之一,而一般的检测方法往往会破坏材料的结构特征。所以,对于颗粒组构关系的检测需要发展无损检测方法。现在一些学者开发的CT检测岩土的方法,对于颗粒组构关系的检测可以借鉴。除了这一无损检测方法之外,也需要研究其他更能反映材料颗粒组构关系的实验检测方法。

3) 结构元集合特征观察实验

根据材料结构状态集合分析理论,材料微结构元集合是影响材料性能的关键,材料的宏观性能其实质是由材料微结构元集合的特性和微结构元的分布即配分函数的形态所决定。材料微结构元集合特征的实验观察是掌握材料性能的关键步骤之一。

材料微结构元集合特征的实验观察其难点在于这是一个动态的观察,需要掌握某种材料基本颗粒构成的情况下,这些颗粒所构成的基本单元的形态的类型和数量。因此,简单的、少量的实验观察是不能解决问题的,需要进行大量的实验观察。这一方面需要耗费大量的人力和物力,另外也需要大量的时间。更困难的需要解决的是怎样在已有的材料结构状态中提取出微结构元的形态模型。也就是采用什么样的实验观察手段来得到颗粒在特定状态下的所谓的微结构元形态。

微结构元形态与颗粒间的构成形态有关,也与颗粒间连接性能有关,因此,这种实验观察可能需要的是多方面的实验观察。所以,微结构元集合的实验观察的设计,可能还需要认真地进行研究,以获得一个可以实施和有效的观察实验方案。

4 结论

通过以上的讨论,初步建立起了分析结构性材料的材料结构状态集合分析理论体系框架和方法思路,为解决结构性材料的问题,提出了一条新的思路,总结以上的讨论,可以得到以下几点结论:

(1) 形成了解决结构性材料的新的思路。结构

性材料的复杂性是众所周知的,为了解决这一问题,本文提出了材料结构状态集合分析的概念,通过对材料所有可能的结构状态集合的性能分析,来理解结构性材料的整体性能。并且通过以上的分析,初步证明这一思路具有可行性;

(2) 建立起了一个基本完整的分析结构性材料的框架体系。新的分析体系从材料的基本微结构开始,通过分析微结构元的组成形态即配分函数,最后得到材料结构的状态集合函数,从而得到结构性材料的整体性能及参数,形成了一条基本完整的分析方法;

(3) 材料结构状态集合分析理论与经典弹塑性理论具有很好的一致性。通过以上的讨论可知,材料结构状态集合分析理论与经典弹塑性理论不存在任何矛盾,材料结构状态集合分析理论更具有一般性,而经典弹塑性理论可以认为是材料结构状态集合分析理论下的特殊情况。

所以,材料结构状态集合分析理论,是通过研究结构性材料形成了一个更具有普遍意义下的理论和方法。尽管如此,但这一理论与方法还有许多问题需要解决,目前的工作只是对于一个新领域打开了一扇小小的窗口,还有许多方面需要进一步的探索。

参考文献:

- [1] 赵珊茸,刘嵘,杨明玲,等. 晶体形态一些基本概念的实际意义分析[J]. 人工晶体学报, 2007, 36(6): 1319—1323.
Zhao Shanrong, Liu Rong, Yang Mingling, et al. Realization about some basic concepts of crystal morphology [J]. Journal of Synthetic Crystals, 2007, 36(6): 1319—1323. (in Chinese)
- [2] 李广慧,韩丽,方奇. 晶体结构控制晶体形态的理论及应用[J]. 人工晶体学报, 2005, 34(3): 547—549.
Li Guanghui, Han Li, Fang Qi. Theory and application of crystal structure controlling its morphology [J]. Journal of Synthetic Crystals, 2005, 34(3): 547—549. (in Chinese)
- [3] 郑颖人,孔亮. 再谈广义塑性力学[J]. 岩土工程学报, 2006, 28(1): 118—121.
Zheng Yingren, Kong Liang. On generalized plastic mechanics [J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2006, 28(1): 118—121. (in Chinese)
- [4] 沈珠江. 土体结构性的数学模型—21世纪土力学的核心问题[J]. 岩土工程学报, 1996, 18(1): 95—97.
Shen Zhujiang. Mathematical model of soil structural property—Kernel problem of soil mechanics in 21CN [J].

- Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 1996, 18(1): 95—97. (in Chinese)
- [5] 谢定义. 21世纪土力学的思考[J]. 岩土工程学报, 1997, 19(4): 111—114.
Xie Dingyi. Thinking 21 century of soil mechanics [J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 1997, 19(4): 111—114. (in Chinese)
- [6] 胡瑞林,王思敬. 21世纪工程地质学生长点: 土体微结构力学[J]. 水文地质工程地质, 1999, 4(4): 5—8.
Hu Ruilin, Wang Sijing. 21 century engineering geology growing point: Soil micromechanics [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 1999, 4(4): 5—8. (in Chinese)
- [7] 沈珠江. 结构性粘土的堆砌体模型[J]. 岩土力学, 2000, 21(1): 1—4.
Shen Zhujiang. A masonry model for structured clays [J]. Rock and Soil Mechanics, 2000, 21(1): 1—4. (in Chinese)
- [8] 沈珠江. 岩土破损力学与双重介质模型[J]. 水利水运工程学报, 2002, 4(4): 1—6.
Shen Zhujiang. Breakage mechanics and double-medium model for geological material [J]. Hydro-science and Engineering, 2002, 4(4): 1—6. (in Chinese)
- [9] 卫振海,王梦恕,张顶立. 颗粒链结构形态土体强度模型研究[J]. 工程力学, 2012, 29(增刊 II), 85—92.
Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. Study on soil strength model in particle chain structure [J]. Engineering Mechanics, 2012, 29(Suppl II), 85—92. (in Chinese)
- [10] 杨光华,李广信. 岩土本构模型的数学基础与广义位势理论[J]. 岩土力学, 2002, 23(5): 531—535.
Yang Guanghua, Li Guangxin. Mathematical foundation of constitutive models of geotechnical material and generalized potential theory [J]. Rock and Soil Mechanics, 2002, 23(5): 531—535. (in Chinese)
- [11] 王国欣,肖树芳. 土结构性本构模型研究现状综述[J]. 工程地质学报, 2006, 14(5): 620—626.
Wang Guoxin, Xiao Shufang. Review on current situation of soil structural constitutive models [J]. Journal of Engineering Geology, 2006, 14(5): 620—626. (in Chinese)
- [12] 卫振海,王梦恕,张顶立. 土结构强度模型研究[J]. 岩土力学, 2013, 34(1): 40—46.
Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. Study of strength model of soil structure [J]. Rock and Soil Mechanics, 2013, 34(1): 40—46. (in Chinese)
- [13] 孙海忠. 基于细观理论的粗粒土剪胀性及本构模型[J]. 同济大学学报自然科学版, 2012, 40(12): 1783—1788.
Sun Haizhong. Dilatancy of coarse aggregates and its modeling based on micro theory [J]. Journal of Tongji University (Natural Science), 2012, 40(12): 1783—1788. (in Chinese)
- [14] 陈铁林,李国英,沈珠江. 结构性粘土的流变模型[J]. 水利水运工程学报, 2003, 6(2): 7—11.

- Chen Tielin, Li Guoying, Shen Zhujiang. Viscous constitutive model for structured clays [J]. *Hydro-Science and Engineering*, 2003, 6(2): 7–11. (in Chinese)
- [15] 卫振海. 岩土材料结构问题研究[D]. 北京: 北京交通大学, 2012.
Wei Zhenhai. Research on the geomaterials structure [D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2012. (in Chinese)
- [16] 卫振海, 王梦恕, 张顶立. 岩土材料结构分析[M]. 北京: 中国水利水电出版社, 2012: 204–234.
Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. Structure analysis of rock and soil [M]. Beijing: China Water Power Press, 2012: 204–234. (in Chinese)
- [17] Alexander E Ehre, Markus B, MikhailItskov. A continuum constitutive model for the active behaviour of skeletal muscle [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2011, 59(59): 625–636.
- [18] Ercan Gurses, Tamer El Sayed. A variational multiscale constitutive model for nanocrystalline materials [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2011, 59(59): 732–749.
- [19] 余文龙, 张健, 张顺峰. 黄土结构性定量化研究新进展[J]. *水文地质工程地质*, 2011, 38(5): 120–127.
Yu Wenlong, Zhang Jian, Zhang Shunfeng. Loess structural quantitative research progress [J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2011, 38(5): 120–127. (in Chinese)
- [20] Riyadh Al-Raoush. Microstructure characterization of granular materials [J]. *Physica A*, 2007, 377(377): 545–558.
- [21] Andrew P Bungera, Elizaveta Gordeliy, Emmanuel Detournay. Comparison between laboratory experiments and coupled simulations of saucer-shaped hydraulic fractures in homogeneous brittle-elastic solids [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2013, 61(61): 1636–1654.
- [22] Claudia Redenbach. Microstructure models for cellular materials [J]. *Computational Materials Science*, 2009, 44(44): 1397–1407.
- [23] 姚仰平, 牛雷, 崔文杰, 等. 超固结非饱和土的本构关系[J]. *岩土工程学报*, 2011, 6(33): 833–839.
Yao Yangping, Niu Lei, Cui Wenjie, et al. UH model for unsaturated soils [J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2011, 6(33): 833–839. (in Chinese)
- [24] 左永振, 程展林, 丁红顺. CT 技术在粗粒土组构研究中的应用[J]. *人民黄河*, 2010, 32(7): 109–111.
Zuo Yongzhen, Cheng Zhanlin, Ding Hongshun. Application of CT technology in the research of coarse grained soil fabric [J]. *Yellow River*, 2010, 32(7): 109–111. (in Chinese)
- [25] 卫振海, 王梦恕, 张顶立. 材料结构全状态函数本构关系模型研究[C]. 沈阳: 第 21 届全国结构工程学术会议论文集, 2012: 465–471.
Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. Study of constitutive relationship model of material structure based on full state function [C]. Shenyang: Proceedings of the 21th National Conference on Structural Engineering, 2012: 465–471. (in Chinese)
- [26] Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. A research on the full state function constitutive relation model [C]. *The Second International Symposium on Constitutive Modeling of Geomaterials: Advances and New Applications*, 2012: 641–648.
- [27] 卫振海, 王梦恕, 张顶立. 静态组构下的颗粒材料本构模型研究[C]. 宁波: 第 20 届全国结构工程学术会议论文集, 2011: 93–104.
Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. Research on the constitutive model of the granular material [C]. Ningbo: Proceedings of the 20th National Conference on Structural Engineering, 2011: 93–104. (in Chinese)
- [28] 卫振海, 王梦恕, 张顶立. 分形结构土体强度研究[J]. *岩土力学*, 2012, 3(33): 67–71.
Wei Zhenhai, Wang Mengshu, Zhang Dingli. Research on the strength of the fractal structure soil [J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2012, 3(33): 67–71. (in Chinese)

注: 该文在第 25 届结构工程学术会议(2016 包头)应邀作特邀报告