基于改进型XFEM的裂纹分析并行软件实现

王理想^{1,2}, 文龙飞^{1,2}, 王景焘^{1,2}, 田荣^{1,2*}

1. 中物院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088;

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088

*E-mail: tian_rong@iapcm.ac.cn

收稿日期: 2017-10-27; 接受日期: 2018-04-28; 网络版发表日期: 2018-10-09

国家重点研发计划(编号: 2016YFB0201004, 2016YFB0201002)、国家自然科学基金(编号: 11472274, 91530319)、科学挑战专题(编号: JCKY2016212A502)和国家自然科学基金委员会-广东省人民政府联合基金(第二期)超级计算科学应用研究专项(编号: U1501501)资助

摘要 扩展有限元法(XFEM)目前已成为裂纹分析的主流数值方法. 然而, 在实际应用中该方法一直受到两方面的困扰: 总体刚度矩阵高度病态以及动力学计算时额外自由度上的能量无法正确传递. 前者导致在以迭代法求解为主的大规模计算中难以收敛, 后者导致动力学求解精度低、实施困难. 为解决这两大困扰, 基于无额外自由度单元分解插值格式, 提出改进型扩展有限元法(IXFEM). 基于该方法, 在高性能数值模拟软件开发框架JAUMIN上开发裂纹分析并行软件—PANDA_Fracture. 实际算例表明, PANDA_Fracture软件具有如下特色: 1) 允许引入高精度裂尖加强, 支持裂纹任意长度扩展; 2) 同时支持动力学裂纹问题隐式求解与显式求解; 3) 支持任意多裂纹问题高效求解; 4) 支持上千CPU核高性能可扩展计算.

关键词 改进型XFEM, 裂纹扩展, 断裂力学, JAUMIN, 高性能计算, PANDA

1 引言

武器装备关键零部件(含能材料结构件等)在过载、冲击、振动/疲劳载荷、热-力耦合等环境下内部裂纹的起裂、扩展、群裂纹演化等力学响应分析以及裂纹结构件承载力评估等, 尽管开展了大量的实验, 也取得了一定的认识, 但基于断裂力学基础的高精度数值模拟, 仍显不足. 主要体现在: 1) 局部应力与断裂机制的合理刻画还需完善, 细观裂纹萌生与发展过程的数值模拟在技术上仍存在困难; 2) 基于裂纹描述的结构承载能力分析, 仍不成熟. 基于试验的评估, 其试验

条件又难以完全覆盖实际工况. 这一现状在一定程度上制约了含能材料结构可靠性与安全性评估的置信度. 目前, 在装备研制过程中, 含能材料结构件的裂纹行为的可信预测迫切, 急需开展以下工作:

- 1) 静力学、周期载荷条件下起裂条件、起裂位置、裂纹扩展路径的预测;
- 2) 力、热、振动等多种载荷的复合环境下的裂纹行为, 如裂纹产生的原因、各种诱因的影响因素、裂纹稳定性、裂纹发展速度等的预测;
- 3) (跌落等)冲击条件下关键构件的裂纹动态扩展行为;

引用格式: 王理想, 文龙飞, 王景焘, 等. 基于改进型XFEM的裂纹分析并行软件实现. 中国科学: 技术科学, 2018, 48: 1241–1258

Wang L X, Wen L F, Wang J T, et al. Implementations of parallel software for crack analyses based on the improved XFEM (in Chinese). Sci Sin Tech, 2018, 48: 1241–1258, doi: [10.1360/N092017-00367](https://doi.org/10.1360/N092017-00367)

4) 含裂纹体的结构完整性与承载能力分析.

传统有限元法模拟裂纹时, 由于裂尖应力的奇异性, 需要在裂尖周围进行大量的网格加密; 模拟裂纹扩展时, 需要对齐裂纹进行网格重新划分; 频繁的网格重分重映引入误差累积, 动力学计算存在能量一致性问题等. 这些使得裂纹扩展模拟成为传统有限元的一个经典难题.

受限上述数值方法上的困难, 断裂力学商业软件的发展也非常缓慢. 目前, 市场上断裂力学专业软件主要有美国的FRANC3D和英国的ZENCRAK. 其中, FRANC3D诞生于康奈尔大学断裂力学研究组, 早期基于边界元开发, 后完全基于有限元方法重构, 并在2010年商业化, 主要服务于美国军方与大型航空公司. FRANC3D裂纹扩展分析流程为: 1) 基于Abaqus和ANSYS等主流有限元商业软件建立完整有限元模型; 2) 在FRANC3D中引入初始裂纹, 并对有限元网格进行重新划分, 整合为含有裂纹的模型; 3) 将含裂纹模型导入Abaqus和ANSYS等软件进行应力分析; 4) 回到FRANC3D中进行应力强度因子计算、裂纹扩展网格更新等局部操作, 网格更新之后执行下一步计算. 目前该软件主要用于静态裂纹扩展分析, 无法支持动力学裂纹扩展分析. ZENCRAK软件的分析流程与FRANC3D相似.

扩展有限元方法的出现是断裂力学软件发展的一个分水岭(图1). 1999年, 美国西北大学Belytschko研究组^[1-3]提出扩展有限元法(extended finite element method, XFEM). 该方法因克服了传统有限元的经典困难, 成为目前裂纹扩展模拟的主流方法. XFEM具有裂纹无需对齐网格、裂纹扩展无需网格重新划分、稀疏网格上可以得到高精度数值解三大突出优点. 该方法自提出以来在学术界引起广泛关注, 发展迅速. 截至2017年底, XFEM奠基性文献^[1,2]合计引用次数已超8000次. 相关研究和应用广泛: Belytschko等^[4]给出了对任意不连续性问题的XFEM描述; Gravouil等^[5]使用XFEM处理三维裂纹问题; Pourmodheji和Mashayekhi^[6]将其用于延性裂纹扩展问题; Singh等^[7]将其用于疲劳裂纹扩展问题; Afshar等^[8]将其用于复合材料断裂问题; Shen和Lew^[9]将其用于不可压材料断裂问题; Bui和Zhang^[10]将其用于磁电材料裂纹问题等. 在中文相关资料方面: 2005年, 李录贤和王铁军^[11]给出了扩展有限元的发展综述; 2007年, 方修君和金峰^[12]基

图1 断裂力学软件现状

于Abaqus实现扩展有限元功能; 2010年, 余天堂^[13]利用扩展有限元法模拟三维裂纹; 2013年, 江守燕和杜成斌^[14]给出了动载下裂纹应力强度因子的变化分析; 2014年, 陈金龙等^[15]对XFEM的裂尖场精度进行研究. 2015年, 束一秀等^[16]将XFEM用于多裂纹扩展分析. 在XFEM应用方面: 2012年, 郑东健等^[17]基于XFEM研究了拱坝裂缝变形问题; 2017年, 黄西成等^[18]基于XFEM与黏聚力模型分析了PBX炸药裂纹萌生与扩展. 更多内容, 可以参考庄茁等^[19]和余天堂^[20]的两本中文专著.

自2010年起, 大型有限元商业软件Abaqus (自6.9版本^[21]开始)和ANSYS (自16.0版本^[22]开始)加入XFEM功能, 标志着该方法在工业界被广泛接受. 从2011年开始, 基于XFEM的开源代码也开始迅速发展, 如法国的Code_Aster、捷克的OOFEM、德国的PERMIX. 国内软件方面, ALOF^[23]采用扩展有限元法, 在裂尖处使用网格自动分层加密技术, 具备三维疲劳裂纹扩展分析能力.

然而, 扩展有限元方法在取得极大成功的同时, 其实际应用一直受到两大问题的困扰: 1) 总体刚度阵病态, 使得大规模问题迭代求解收敛困难; 2) 动力学计算能量不守恒、精度低, 使得静力学裂尖加强方案无法直接推广到动力学计算.

扩展有限元方法, 在理论上基于单位分解广义有有限元方法(PUM)^[24,25]. 源于单位分解插值的线性相关性^[24-26], 当在局部或全求解域上进行插值加强时, 总体刚度矩阵高度病态^[27,28]. 当加强基函数为多项式时, 矩阵奇异. 而且随网格加密或基函数阶次提高, 病态趋于严重. 虽然XFEM仅在局部进行插值加强, 线性相关

性问题较全求解域上加强有所减弱,但稳定性问题仍然存在^[28-32],具体表现在,总体刚度阵条件数随 h^{-6} 变化(标准有限元为 h^{-2}).由于该稳定性问题, XFEM在稳态问题和动力学隐格式求解时,线性方程组迭代收敛慢或无法收敛.

XFEM在动力学计算中遇到的困难,具体表现为两个方面: 1) “零临界时间步长”问题. 当采用一致质量, 裂尖单元的临界时间步长会趋于零^[33]. 这一问题直到2006年Menouillard等^[34]提出集中质量方案才得以解决. 但是临界时间步长大约只有同样网格标准有限元的一半. 2) 能量正确传递问题. 在稳态问题中, 当裂纹离开单元后, 原来裂尖加强节点可以简单退化为阶跃加强节点, 原来裂尖加强额外自由度可以舍弃. 但在动力学问题中, 额外自由度对应的质量、速度和加速度项均与裂尖位置历史相关. 当裂尖离开单元时, 如果简单地舍弃原有裂尖加强自由度, 两个时间步之间的能量无法正确传递, 会破坏能量守恒. 简言之, 就是静力学的裂尖加强方案不能直接推广到动力学计算中. 这一问题长期困扰XFEM在动力学问题中的应用^[33].

对于总体方程高度病态问题或稳定性问题, Babuška和Banerjee^[30]于2012年提出稳定化广义有限元方法. 随后, Gutpa等^[31,32]在高维问题中深入研究了该方法. “稳定化”的基本思想是将局部加强函数与局部有限元插值之间的差作为新的局部加强函数. 这一改进使得广义有限元的总体矩阵条件数恢复了 h^{-2} 变化的性质^[32], 但广义自由度仍然被保留了下来. 因此, 在动力学问题中, 稳定化广义有限元方法仍然会遇到目前XFEM相类似的问题.

对于XFEM在动力学计算中遇到的困难, Belytschko等^[33]的早期工作建议舍弃裂尖加强、仅依靠阶跃函数和黏聚力单元处理裂纹扩展的动力学问题. 但这样做等于不得不放弃XFEM的核心优势“裂尖加强带来的高精度”. 2005~2008年, Réthoré等^[35]、Prabel等^[36]、Combescure等^[37]提出了一种解决办法, 其基本思想是: 继续使用裂尖加强以维持XFEM的高精度优势, 但为了能量守恒, 裂纹扩展后, 即使裂尖离开单元, 原有裂尖节点(现在成为切割单元节点)仍然保留裂尖加强自由度, 同时对应于新的裂纹构型, 增加新的裂尖加强自由度或者增加阶跃加强自由度. 然而, 这个方法

虽然保证了能量守恒, 但并没有提高动态应力强度因子的计算精度, 同时额外自由度的不断增加进一步恶化了总体刚度阵的条件性态.

由于扩展有限元方法在刚度阵病态和动力学计算能量不守恒两方面的困难, 目前主流商业软件Abaqus和ANSYS等的扩展有限元模块仅支持静态裂纹扩展, 且裂纹扩展时不支持高精度裂尖加强, 裂纹每次需切穿整个单元扩展. 见表1, “√”表示支持, “×”表示不支持. 从该表可以看出, 目前Abaqus和ANSYS扩展有限元模块仅在计算稳定裂纹问题时, 采用裂尖加强; 在求解裂纹扩展问题时, 不包含裂尖加强; 不支持裂纹隐式动力学求解; 在计算裂纹扩展时, 每次扩展长度只能是一个单元长度, 不支持裂纹任意长度扩展. 基于同样原因, 动力学有限元软件LS-DYNA的XFEM模块应用也较少.

由于整体结构与局部裂纹的空间尺度在量级上的差异, 装备关键结构件断裂的数值模拟高度依赖精细建模与精细模拟(断裂能释放率的准确计算)两方面的能力. 然而, 据笔者所知, 裂纹扩展分析恰恰在两个方面仍存在困难: 1) 动力学裂纹扩展计算仍然缺乏高精度方法; 2) 大规模并行断裂力学软件仍较为缺乏.

为解决现有XFEM的数值困难, 笔者提出无额外自由度单位分解插值格式^[38], 对现有扩展有限元法进行了改进^[39-42]. 为满足复杂工程应用需求, 我们基于高性能数值模拟软件开发框架JAUMIN^[43,44], 开发出高性能有限元CAE软件PANDA^[45,46]. 在这些基础上, 我们实现基于改进型XFEM的裂纹分析并行软件PANDA_Fracture. 相对于商业软件的XFEM功能, 该软件的特点是: 在静力、动力学裂纹扩展分析均可采用高精度裂尖加强, 具有更好的数值精度, 支持裂纹任意长度扩展, 避免裂纹扩展路径的网格依赖, 支持任意裂纹问题的大规模并行计算.

表1 主流商业软件中XFEM模块功能

软件功能	Abaqus 2016	ANSYS 17.0 (2016)
稳定裂纹裂尖加强	√	√
扩展裂纹裂尖加强	×	×
显式动力学求解	√	×
隐式动力学求解	×	×
裂纹任意长度扩展	×	×

2 改进型XFEM简介

2.1 无额外自由度的单位分解插值

记 Ω_{tip} 为包含裂尖一子区域, 域内所有节点采用裂尖加强. 记 P_i^r 为节点 i 的节点影响域, 该影响域由节点 i 周围半径 r 范围内所有节点构成. 节点 i 称为节点影响域 P_i^r 的“片星节点”. 记 $I_i = \{k \in I : x_k \in P_i^r\}$ 为 P_i^r 上所有节点编号集合; $J_i = \{k \in I : x_i \in P_k^r\}$ 为包含节点 i 的节点影响域编号集合. 显然, I_i 与 J_i 这两个集合完全相同, 分开定义是为了明确逻辑关系.

在片星节点 i 的影响域 P_i^r 上, 构造位移函数 $u_i(\mathbf{x})$ 的局部逼近^[38-42]:

$$u_i^{\text{loc}}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}, \quad \mathbf{x} \in P_i^r, \quad (1)$$

$$u_i^{\text{loc}}(\mathbf{x}_i) = u_i, \quad (2)$$

式中, $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ 为基向量, $\mathbf{a}$ 为未知系数向量. 式(2)为强制过点插值条件. 在裂尖附近, 基向量 $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ 选为

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}) = \left[1, \frac{x-x_i}{ch}, \frac{y-y_i}{ch}, f_\alpha(r, \theta) - f_\alpha(r_i, \theta_i) \right]^T, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \{f_\alpha(r, \theta) | \alpha = 1, \dots, 4\} \\ &= \left\{ \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2} \sin \theta, \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2} \sin \theta \right\}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中, ch 表示节点片尺寸, 其中 h 为单元尺寸, c 为常数, 一般取为2~3, r 和 θ 为裂尖极坐标.

为构造出通过片星节点 i 的局部逼近, 定义以下带约束的 L_2 误差范数:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k \in I_i} (\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_k)\mathbf{a} - u_k)^2 + \lambda (\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i)\mathbf{a} - u_i), \quad (5)$$

式中, λ 为Lagrange乘子, 用于满足过点插值条件(2).

对式(5)取极值, 即令

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{a}} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \lambda} = 0, \quad (6)$$

可得

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{p}_i \\ \mathbf{p}_i^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a} \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}\mathbf{u} \\ u_i \end{pmatrix}, \quad (7)$$

式中, $\mathbf{p}_i$ 为 $\mathbf{p}(\mathbf{x}_i)$ 的缩写, 矩阵 $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$ 和向量 $\mathbf{u}$ 分别为

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum_{k \in I_i} \mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^T, \\ \mathbf{B} &= [\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_i, \dots, \mathbf{p}_{n_i}], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_i, \dots, u_{n_i})^T,$$

其中 n_i 为节点集 I_i 的节点个数.

通过消去式(7)中的Lagrange乘子 λ , 可求得未知系数向量 $\mathbf{a}$, 从而

$$u_i^{\text{loc}}(\mathbf{x}) = \sum_{k \in I_i} \phi_k^i(\mathbf{x}) u_k, \quad (9)$$

$$\phi_k^i(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x}) \left(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{p}_k - \frac{\mathbf{A}_{(1)}^{-1} \mathbf{A}_{(1)}^{-T} \mathbf{p}_k}{\mathbf{A}_{11}^{-1}} + \frac{\mathbf{A}_{(1)}^{-1} \delta_{ik}}{\mathbf{A}_{11}^{-1}} \right), \quad (10)$$

式中, $\mathbf{A}_{(1)}^{-1}$ 为 $\mathbf{A}^{-1}$ 的第一列, $\mathbf{A}_{11}^{-1}$ 为 $\mathbf{A}_{(1)}^{-1}$ 的第一个元素, δ 为Kronecker符号.

将式(9)中 $u_i^{\text{loc}}(\mathbf{x})$ 作为标准有限元节点位移 u_i 在节点片上一个局部近似, 便得到一种新的逼近形式:

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_i N_i u_i^{\text{loc}}(\mathbf{x}) = \sum_i N_i \left(\sum_{k \in I_i} \phi_k^i(\mathbf{x}) u_k \right). \quad (11)$$

将式(11)中的所有项展开, 按相同节点归类并重新组合后得到

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_i N_i \phi_i^i(\mathbf{x}) + \sum_{k \in J_i, k \neq i} N_k \phi_i^k(\mathbf{x}) u_i. \quad (12)$$

2.2 改进型XFEM

基于式(12)的裂尖加强, 顾及非裂尖区域的标准XFEM插值, 即得到改进型XFEM形式:

$$\begin{aligned} u^h(\mathbf{x}) &= \sum_{i \in I} N_i u_i + \sum_{i \in K \subset I} N_i (H(\mathbf{x}) - H(\mathbf{x}_i)) a_i \\ &+ \sum_{i \in J} \left(N_i \phi_i^i + \sum_{k \in J_i, k \neq i} N_k \phi_i^k \right) u_i, \end{aligned} \quad (13)$$

式中, J 为裂尖加强节点集, K 为阶跃加强节点集, I 为标准有限元节点和阶跃加强节点的集合, a_i 为阶跃加强自由度, $H(\mathbf{x})$ 为Heaviside阶跃函数. 改进型XFEM简记为IXFEM, 其与现有XFEM的区别仅在于裂尖加强项. 新的裂尖加强节点不再包含额外自由度.

2.3 混合单元修正

如图2所示, 混合单元为同时包含加强节点与有限元节点的单元. 为保证XFEM算法的精度和收敛性, 混

图2 (网络版彩图)混合单元及节点集

合单元的形函数需加以修正.

第一类修正: 加强节点仅为阶跃加强节点, 此时通过阶跃函数的简单平移消除影响. 第二类修正: 加强节点中至少有一个为裂尖加强节点, 需特殊处理. 通过引入如下斜坡函数^[38-42]:

$$R(\mathbf{x}) = \sum_{i \in J} N_i(\mathbf{x}), \quad (14)$$

$$R(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Omega_{tip}, \\ 0, & \mathbf{x} \in \Omega_{fem}. \end{cases} \quad (15)$$

则混合单元上具有如下位移逼近:

$$u^h(\mathbf{x}) = (1 - R(\mathbf{x}))u_{fem}^h + R(\mathbf{x})u_{tip}^h, \quad (16)$$

式中, u_{fem}^h 为常有限元位移逼近, u_{tip}^h 为裂尖无额外自由度单位分解位移逼近.

在全求解域上引入记号:

$$\tilde{N}_i = \begin{cases} (1 - R)N_i, & i \in I^*, \\ RN_i, & i \in J^*. \end{cases} \quad (17)$$

最终经混合单元修正的改进型XFEM表达式为

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{i \in I^*} \tilde{N}_i u_i + \sum_{i \in K} \tilde{N}_i (H(\mathbf{x}) - H(\mathbf{x}_i)) a_i + \sum_{i \in J^*} \left(\tilde{N}_i \phi_i^i + \sum_{k \in J_i^*, k \neq i} \tilde{N}_k \phi_i^k \right) u_i, \quad (18)$$

式(14)~(18)中, 各节点集定义如下: I 为 Ω_{fem} 节点集, J 为 Ω_{tip} 节点集, K 为阶跃加强节点集; I^* 为 Ω_{fem} 和 Ω_{blend} 上节点集合, $K \subset I^*$, J^* 为 Ω_{tip} 和 Ω_{blend} 上节点集合.

3 裂纹相关计算

3.1 应力强度因子计算

为实现裂纹扩展计算功能, 需计算裂纹尖端应力

强度因子. 它是表征裂纹尖端应力-应变场强度的重要参量. 在线弹性断裂力学中, 对裂纹尖端位移、应变和应力场的求解, 可归纳为对应力强度因子的求解. 应力强度因子的常见计算方法有虚裂纹闭合法、位移外推法和相互作用积分法等, 其中相互作用积分法具有精度高、适应范围广的特点.

相互作用积分的定义如下^[47]:

$$I^{(1,2)} = \int_{\Gamma} \left[W^{(1,2)} \delta_{lj} - \sigma_{ij}^{(1)} \frac{\partial u_i^{(2)}}{\partial x_1} - \sigma_{ij}^{(2)} \frac{\partial u_i^{(1)}}{\partial x_1} \right] n_j d\Gamma, \quad (19)$$

式中, $(\sigma_{ij}^{(1)}, \varepsilon_{ij}^{(1)}, u_i^{(1)})$ 为真实场, $(\sigma_{ij}^{(2)}, \varepsilon_{ij}^{(2)}, u_i^{(2)})$ 为辅助场, $W^{(1,2)} = \sigma_{ij}^{(1)} \varepsilon_{ij}^{(2)} = \sigma_{ij}^{(2)} \varepsilon_{ij}^{(1)}$ 为相互作用应变能密度, Γ 为一条围绕裂尖的周线, n_j 为 Γ 的外法向单位向量, 如图3所示.

当 Γ 接近裂纹尖端时, 相互作用积分与真实变形场和附加变形场的应力强度因子存在以下关系:

$$I^{(1,2)} = \frac{2}{E^{\text{eff}}} (K_I^{(1)} K_I^{(2)} + K_{II}^{(1)} K_{II}^{(2)}), \quad (20)$$

式中, 对于平面应变问题 $E^{\text{eff}} = E / (1 - \nu^2)$, 对于平面应力问题 $E^{\text{eff}} = E$.

由式(20)可知, 当 $K_I^{(2)} = 1, K_{II}^{(2)} = 0$, 辅助场为I型裂纹尖端场, 可直接求得真实裂纹尖端场的I型分量 $K_I^{(1)} = I^{(1,2)} E^{\text{eff}} / 2$. 同理, 当 $K_I^{(2)} = 0, K_{II}^{(2)} = 1$, 辅助场为II型裂纹尖端场, 可求得 $K_{II}^{(1)} = I^{(1,2)} E^{\text{eff}} / 2$.

在实际运算中, 为计算方便, 将式(19)中积分项乘以一个光滑权函数 q , 将线积分转化为一个等效面积分. 在围线 Γ 以内取 $q(\mathbf{x}) = 1$, 在围线 C_0 以外取 $q(\mathbf{x}) = 0$. 这样式(19)可写成如下形式:

$$I^{(1,2)} = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \left\{ \int_C \left[W^{(1,2)} \delta_{lj} - \sigma_{ij}^{(1)} \frac{\partial u_i^{(2)}}{\partial x_1} - \sigma_{ij}^{(2)} \frac{\partial u_i^{(1)}}{\partial x_1} \right] q m_j ds \right\} = \int_A \left[W^{(1,2)} \delta_{lj} - \sigma_{ij}^{(1)} \frac{\partial u_i^{(2)}}{\partial x_1} - \sigma_{ij}^{(2)} \frac{\partial u_i^{(1)}}{\partial x_1} \right] q_j dA, \quad (21)$$

式中, $C = \Gamma \cup C_0 \cup C_+ \cup C_-$, A 为由 Γ, C_0, C_+ 和 C_- 组成的闭合区域, 如图3所示, m_j 为区域 A 的外法向. IXFEM在实际计算中的相互作用积分区域 A 如图4中填充区域所示, 图中 r 为相互作用积分区域半径.

图3 相互作用积分中几何定义

图4 (网络版彩图)相互作用积分区域

同时,我们也注意到,上述相互作用积分主要适用于各向同性均匀材料。对于各向异性材料和材料界面附近,应采用Yu等^[48]提出的更为有效的相互作用积分方法。

3.2 裂纹扩展计算

由于在函数空间上表征非连续性, XFEM这类方法在模拟裂纹时, 裂纹扩展完全独立于网格, 因此裂纹扩展方向与长度不再依赖于网格。

关于裂纹扩展准则, 本文采用1963年Erdogan和Sih提出的最大周向拉应力强度因子理论^[49]。裂纹临界断裂韧度为

$$K_{\theta C} = \cos \frac{\theta_0}{2} \left(K_I \cos^2 \frac{\theta_0}{2} - \frac{3K_{II}}{2} \sin \theta_0 \right), \quad (22)$$

式中, 裂纹扩展角度 θ_0 为

$$\theta_0 = 2 \arctan \frac{1}{4} \left[\frac{K_I}{K_{II}} \pm \sqrt{\left(\frac{K_I}{K_{II}} \right)^2 + 8} \right], \quad (23)$$

其中 θ_0 从原裂纹面沿逆时针方向算起, 范围为 $(-\pi, \pi)$ 。当 $K_{II}=0$ 时, $\theta_0=0$; 当 $K_{II}>0$ 时, $\theta_0<0$; 当 $K_{II}<0$ 时, $\theta_0>0$ 。

4 PANDA_Fracture并行软件实现

4.1 JAUMIN高性能数值模拟软件编程框架

JAUMIN是“并行自适应非结构网格应用软件编程框架(J adaptive unstructured mesh applications INfra-structure)”的简称, 是面向非结构网格应用软件研制的编程框架^[43,44]。

JAUMIN框架基于MPI和OpenMP混合并行编程模型, 集成了高性能计算共性技术, 提供屏蔽并行实现细节(如并行数据管理、并行分区、负载平衡、性能优化、通信)的构件化编程模型和接口, 支撑工程领域专家以“并行思考、串行编程”的方式研制应用软件, 大幅降低并行应用软件编程难度, 从而实现并行应用软件快速研制, 并保证其高可扩展性。

为了支撑应用软件快速并行化, JAUMIN使用以patch为中心的编程模型。所谓patch, 是指存储了拓扑数据、坐标数据和场数据的一片子网格, 它是开展并行计算的基本单元。在JAUMIN上实施并行计算时, 仅需基于patch编写串行数值核函数程序, JAUMIN框架自动实现patch与patch间的并行计算。

4.2 JAUMIN、PANDA与PANDA_Fracture

JAUMIN框架目前具备基本的有限元计算支撑功能。为进一步支撑更为复杂的有限元高性能计算(如多物理场耦合计算、裂纹模拟、大变形模拟), PANDA软件凝练了高性能计算力学共性层技术。

该共性层包括对接JAUMIN框架的接口与基本工具、计算力学共性数据结构与算法、共性数值方法、共性求解流程与策略等(图5)。例如, 在共性数值方法中, 不仅支持传统有限元方法(FEM), 还实现了对扩展有限元方法(XFEM)的支持。

该共性层在底层实现与JAUMIN框架的对接, 在顶层支撑行业应用软件的研发。目前, 基于高性能计算力学共性层技术开发的高性能CAE软件包括:

- 1) 静力与振动分析软件PANDA_StaVib;
- 2) 裂纹分析软件PANDA_Fracture;
- 3) 冲击动力学分析软件PANDA_Impact.

4.3 PANDA_Fracture软件设计

4.3.1 整体架构设计

将图5中的PANDA_Fracture软件与高性能计算力

图 5 (网络版彩图) PANDA软件体系结构

学共性层抽离出来, 进行细化, 可得到图6所示的PANDA_Fracture软件架构图。PANDA_Fracture软件在“高性能计算力学共性层”中实现了扩展有限元算法, 在“应用软件”层中提供以下裂纹分析个性功能: 非连续IO、非连续几何、断裂模型/准则与接口、宏观裂纹分析、细观裂纹分析等。

4.3.2 概念设计

计算固体力学求解核心是离散如下积分弱形式:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (\nabla N)^T D (\nabla N) u d\Omega \\ &= \sum_e \sum_g \left[(\nabla N_g^e)^T D (\nabla N_g^e) |J^e| w_g^e \right] u_i^e \\ &= \sum_e \mathbf{K}^e \mathbf{u}^e = \mathbf{K} \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (24)$$

这一过程中涉及两个关键的概念, 即插值和积分。

式(24)中, 与插值相关的包括插值形函数 N^e , 插值定义域 V^e , 自由度 u^e ; 与积分相关的包括高斯积分点 g , 积分定义域 Ω^e , 积分权重 w^e , 雅可比行列式 $|J^e|$ 。通过实现插值和积分, 完成单元刚度矩阵计算和总体刚度矩阵集成。

如图7所示, 对于传统有限元方法, 插值和积分均以有限元单元为基础, 也就是说插值域和积分域即有限元单元, 是相同的。然而, 对于扩展有限元(XFEM)、广义有限元(GFEM)等这类新的数值方法, 其插值域和积分域未必相同。例如, 在XFEM实现过程中, 插值域由于插值模板的改变而发生改变, 积分域由于裂纹切割也会发生改变。这将导致XFEM插值域与积分域发生改变。

为了支持XFEM这类新的数值方法, 将插值和积分这两个操作进行分离, 如图8所示。二者共同建立在一片几何区域(GeometryMesh, 实现并行计算中几何数据管理与操作)之上; 对于插值相关的操作, 在插值网格(MathMesh)中实现; 对于积分相关的操作, 则在积分网格(QuadratureMesh)中实现。

插值网格管理若干插值单元(MathElement), 而积分网格管理若干积分单元(QuadratureCell)。插值单元提供插值所需要的插值连接关系(MathConnectivity)和插值形函数(ShapeFunction)等数据; 积分单元提供积分方法(QuadratureRule)、积分点(QuadraturePoint)等数据。插值连接关系与插值形函数、积分点与积分方法的分开设计体现了数据与算法分离的思想。

图 6 (网络版彩图) PANDA_Fracture软件架构

图 7 (网络版彩图)插值域与积分域

图 9 插值单元与积分单元生成

图 8 (网络版彩图)插值与积分分离

PANDA_Fracture中插值单元和积分单元通过几何单元(即初始有限元单元)与裂纹的几何关系生成. 例如, 对于裂纹切割单元(图9), 在生成插值单元时, 通过引入虚节点(phantom node)^[50], 构造单元新的插值连接关系, 同时在虚节点上引入自由度; 在构造积分单元时, 需要对积分域进行子三角化, 通过在子三角形上布置高斯积分点, 实现数值积分计算. 需要进行子三角化的单元包括裂尖单元和切割单元这两类.

4.3.3 求解流程设计

程序求解流程需要调用如下模块: 非连续IO模块、非连续几何模块、单元插值模块、单元积分模块和断裂模型/准则模块等, 如图10所示.

求解流程中各模块之间的作用如下:

- 1) 非连续IO模块: 为非连续几何模块读入初始裂纹等非连续几何信息;
- 2) 非连续几何模块: 为单元插值/积分模块分别提

图 10 (网络版彩图) PANDA_Fracture求解流程

- 供插值连接关系/高斯积分点和权重;
- 3) 单元插值模块: 为单元积分模块提供高斯积分点处插值信息;
 - 4) 单元积分模块: 向JAUMIN提供单元刚度矩阵, 从而由JAUMIN实现组装和求解;
 - 5) 断裂模型/准则模块: 获得JAUMIN解向量, 从而计算应力强度因子, 并根据断裂准则判断裂纹是否扩展; 向非连续IO模块提供位移场、应力场等数据, 用于后处理显示.

4.3.4 并行特殊处理

JAUMIN在设计之初, 尚未考虑到扩展有限元方法的一些特殊性, 如裂尖加强、裂纹扩展导致的网格拓扑改变等. 因此, 在JAUMIN上实现IXFEM并行化时, 还需要进行一定的特殊处理.

(1) 多层影像区设置

传统FEM在进行并行计算时, 仅需1层影像区进行数据通信. 与传统FEM相比, IXFEM多了虚节点加强和无额外自由度的裂尖加强, 如图11所示. 其中虚节点加强影响范围与FEM一样, 为1层单元(图中半径 r_1). 而无额外自由度裂尖加强, 由于基于最小二乘法, 构造插值函数过程中需要用到周围多层单元节点信息. 因此在并行实现时, 每个并行分区上需比传统FEM更多层的影像区. 影像区的层数, 由裂尖加强节点的影响域半径决定, 一般为2~3层(图中半径 r_2).

(2) 裂纹与相关单元信息通信

如图12所示, 对于裂纹在本地patch边界单元内发生扩展, 如果裂尖是首次进入patch边界单元, 则需要将裂尖信息、裂尖单元信息通信到邻居patch. 如果裂尖贯穿patch边界单元, 则还需要将裂纹切割单元信息通信到邻居patch. 裂纹扩展完成后, 若裂尖穿出本patch影像区, 则需要将其在patch上删除.

由于裂纹扩展, 与裂纹相关单元信息会发生较大改变. 所以本地patch边界上所有与裂纹相关单元, 均需要通信裂纹相关单元信息, 通信内容包括单元拓扑、插值类型、积分网格、裂纹切割界面等. 当本地patch从邻居patch接收到切割单元信息时, 则覆盖本地影像区相应单元信息.

(3) 拓扑一致性

如图13所示, 当裂纹跨越patch边界时, 需在不同patch上分别增加虚点. 实际上, 不同patch上虚节点, 若其几何位置相同, 则应是同一虚节点(图中2'-1和2'-2, 5'-1和5'-2应为同一虚节点), 其自由度在自由度列表上也应该保持一致. 为保证这种拓扑一致性, 作如下操作: 1) 对单元和节点按指定规则进行排序, 保证相邻patch上同一单元节点顺序一致; 2) 单元切割后按指定规则新增虚节点, 重建单元拓扑, 重建拓扑后相邻patch上保持一致; 3) 对同一裂纹在同一位置的新增虚节点进行聚合, 更新patch上的自由度列表.

5 算例展示

PANDA_Fracture软件通过引入一系列的理论算例、数值算例、实验算例, 形成一套标准算例库, 以此验证软件精度与可靠性. 标准算例库通过引入自动化测试机制, 可自动执行测试和对比.

图11 (网络版彩图) 多层影像区

图12 裂纹在patch间通信

图13 (网络版彩图) 拓扑一致性

5.1 软件精度验证

5.1.1 单裂纹问题精度验证

无限大板内有一倾斜裂纹, 受单向拉伸应力 σ 作用, 如图14所示. 图中使用有限大方板进行计算, 边长 $w=50$, 远大于裂纹长度 $2a=2$, 裂纹倾角 $\beta=0^\circ\sim 90^\circ$, 所使用计算网格为均匀网格, 网格数为 399×399 . 使用IX-FEM进行应力强度因子求解, 为保证计算精度, 裂纹长度与单元尺寸比应取为5以上, 本算例中的比值约

为8. 物理参数为弹性模量 $E=1000$, 泊松比 $\nu=0.3$. 施加的载荷为均匀拉应力 $\sigma=1$. 平面应变假设. 该问题应力强度因子具有解析解^[51]:

$$\begin{cases} K_I = \sigma\sqrt{\pi a} \cos^2\beta, \\ K_{II} = \sigma\sqrt{\pi a} \sin\beta\cos\beta. \end{cases} \quad (25)$$

裂尖应力强度因子PANDA_Fracture数值解与理论解对比如图15所示. 由该图可知, PANDA_Fracture计算的应力强度因子 K_I 、 K_{II} 数值解与理论解一致, 由此可验证软件计算静力问题正确性. 此外, $\beta=40^\circ$ 时裂尖附近von Mises应力场如图16所示.

5.1.2 多裂纹问题精度验证

选取有限大板十字交叉裂纹模型进行对比验证(图17). 该板受双向拉伸应力 σ 作用, 板中心包含一对十字交叉裂纹. 板长 $2w=2$, 拉应力 $\sigma=1$, 弹性模量 $E=1000$, 泊松比 $\nu=0.3$. 计算网格为均匀网格, 网格数为 99×99 . 本算例中最小的裂纹长度与单元尺寸比约为5. 平面应变假设. 归一化应力强度因子定义为

图14 (网络版彩图)无限大板斜裂纹问题计算模型

图15 倾斜裂纹应力强度因子数值解与理论解对比

图16 (网络版彩图) (a)裂纹倾角 $\beta=40^\circ$ 时von Mises应力场及(b)局部放大图

图17 (网络版彩图)有限大板十字交叉裂纹

$$F_I = \frac{K_I}{\sigma\sqrt{\pi a}}. \quad (26)$$

表2给出 a/w 从0.1到0.6变化过程中归一化应力强度因子与文献的对比结果. 随着 a/w 从0.1到0.6变化, 几种方法得到应力强度因子都逐渐增大, 且数值较为接近. 当 a/w 较小时, 此问题可近似为无限大板中心交叉裂纹问题, 其解析解为 $F_I=0.8639$. 当 $a/w=0.1$ 时, PANDA_Fracture结果为0.8651, 与解析解非常接近. 图18给出了 $a/w=0.6$ 时的von Mises应力场, 4个裂尖处的应力分布和大小相同, 且关于交叉点相互对称.

5.1.3 网格加密对计算精度影响

图19所示为单边裂纹受拉伸作用有限大板, 板的尺寸分别为: 宽 $2b=14$, 高 $2h=16$. 双边裂纹长度均为 $a=3.5$. 弹性模量为 $E=1000$, 泊松比为 $\nu=0.3$. 板两端受单向拉伸应力 σ 作用, $\sigma=1$. 平面应变假设. 该问题应力强度因子具有参考解^[54]:

$$K_I^{\text{ref}} = \sigma\sqrt{\pi a} g(\xi), \quad (27)$$

式中, $\xi = a/b$; $g(\xi)$ 为经验函数, 其形式如下:

表2 归一化应力强度因子计算结果对比

a/w	PANDA	石路杨 ^[52]	Daux ^[3]	Cheung ^[53]
0.1	0.8651	0.8639	0.8653	0.8641
0.2	0.8761	0.8864	0.8844	0.8800
0.3	0.9044	0.9183	0.9147	0.9092
0.4	0.9592	0.9583	0.9572	0.9537
0.5	1.0288	1.0219	1.0253	1.0223
0.6	1.1338	1.1301	1.1348	1.1300

图18 (网络版彩图)十字交叉裂纹von Mises应力场

图19 (网络版彩图)单向受拉伸双边裂纹模型

$$g(\xi) = (1.122 - 0.561\xi - 0.205\xi^2 + 0.471\xi^3 - 0.190\xi^4) / (1 - \xi)^{1/2}. \quad (28)$$

采用式(27)计算得到应力强度因子 $K_I^{\text{ref}}=3.9263$. 计算分别使用3种均匀网格 39×39 、 59×59 、 79×79 , 计算结果见表3. 从表中可知, 随网格加密, 自由度增多, 裂纹长度与单元尺寸比(a/h)变大, 计算精度逐渐提高.

表3 不同网格下应力强度因子计算精度对比

网格	自由度数	a/h	PANDA	相对误差(%)
39×39	3280	9.75	3.9450	+0.4839
59×59	7320	14.75	3.9318	+0.1477
79×79	12960	19.75	3.9252	-0.0002

5.1.4 裂纹任意扩展问题精度验证

如图20所示, 双臂梁内含有一条边裂纹^[20], 双臂梁尺寸为 $W \times L=2 \times 6$, 其右端固支, 左端受集中力载荷 $P_1=1$, $P_2=1.01$. 计算分别使用3种不同均匀网格 25×75 、 35×105 、 45×135 . 初始裂纹位于悬臂梁中心轴上, 长度为 $a=2.05$. 设定裂纹总共扩展16步, 每一步裂纹扩展长度为0.1.

(1) 裂纹任意扩展精度验证

以中等计算网格 35×105 为例进行裂纹扩展精度验证. 分别使用XFEM^[2]、Corrected XFEM^[55]计算结果作为参考解, 与PANDA_Fracture计算结果进行对比, 如图21所示. 从图中可以看出, PANDA_Fracture计算的裂纹扩展路径与XFEM、Corrected XFEM计算结果非常接近. 由此可知, PANDA_Fracture在计算裂纹扩展时, 计算精度与XFEM和Corrected XFEM精度相当.

(2) 网格对裂纹扩展路径影响

计算3种不同网格下裂纹扩展路径, 如图22所示. 从图中可看出, 随网格加密, 裂纹扩展路径收敛. 取 25×75 网格下裂纹扩展路径, 按扩展步绘制如图23所示(局部放大). 该图显示了裂纹独立于网格而扩展的特点.

5.1.5 动力学裂纹问题精度验证

含I型裂纹的受拉半无限大板问题是动态强度因子精度分析的经典算例. 其几何模型如图24所示, 一边缘有缺口的两端约束板, $L=10 \text{ m}$, $H=2 \text{ m}$, 裂纹长度 $a=5 \text{ m}$, 密度 $\rho=8000 \text{ kg/m}^3$, 弹性模量 $E=210 \text{ GPa}$, 泊松比 $\nu=0.3$. 在 $t=0$ 时刻, 板上缘受到突然施加大小为 $\sigma_0=500 \text{ kPa}$ 均布拉应力作用. 保持不扩展, 采用一致质量和集中质量分别计算动态应力强度因子, 并与解析解比较. 平面应变假设.

该问题的动态应力强度因子解析解如下^[56]:

$$K_I^{\text{dyn}}(\dot{a}, t) = k(\dot{a})K_I^{\text{dyn}}(0, t), \quad (29)$$

图 20 (网络版彩图)非对称双臂梁裂纹扩展

图 24 (网络版彩图)含I型裂纹的受拉半无限大板

图 21 (网络版彩图)裂纹扩展路径对比

图 22 (网络版彩图)不同网格下裂纹扩展路径对比

图 23 (网络版彩图)使用25×75网格计算得到的裂纹扩展路径

式中,

$$k(\dot{a}) = \frac{1 - \dot{a}/c_r}{1 - \dot{a}/2c_r}, \quad (30)$$

$$K_I^{\text{dyn}}(0, t) = \begin{cases} 0, & t < t_c, \\ \frac{2\sigma_0}{1-\mu} \sqrt{\frac{c_d(t-t_c)(1-2\mu)}{\pi}}, & t \geq t_c, \end{cases} \quad (31)$$

式中, $\dot{a}$ 是裂纹的瞬时扩展速度, $t_c = H/c_d$ 为应力波从梁上缘到达裂尖的时间, c_d 为膨胀波速, μ 为拉梅常数. 由于解析解是针对无限大板的, 而模拟是有限大板, 因此在应力波从梁上缘穿过裂尖到达梁下缘, 经反射重新达到裂尖之前要终止模拟, 故模拟时间 $t \leq 3t_c = 1.009 \times 10^{-3} \text{ s}$.

计算网格取为 39×79 的均匀网格, 时间步长 $\Delta t = 7.5 \mu\text{s}$, 计算的物理时间 $t = 1 \text{ ms}$. PANDA_Fracture 软件 (IXFEM) 与 XFEM 在高斯积分、加强范围和相互作用积分半径等方面完全相同. 为便于比较, 应力强度因子除以 $\sigma_0 \sqrt{H}$ 进行无量纲化, t 除以 t_c 进行无量纲化.

图25分别给出PANDA_Fracture (图中PANDA曲线)与XFEM使用一致和集中质量时动态应力强度因子的结果对比. 由图可知: 1) PANDA使用一致质量和集中质量的结果相当, 说明质量集中对方法精度影响小; XFEM在使用集中质量时, 数值振动明显; 2) 使用一致质量时, PANDA与XFEM精度相当; 但当采用集中质量时, PANDA震荡幅度明显减小, 精度更好.

5.2 软件可靠性验证

5.2.1 并行正确性验证

如图26所示, 双臂梁内含有一条边裂纹^[20], 双臂梁尺寸为 $W \times L = 2 \times 6$, 其右端固支, 左端受集中力载荷 $P = 1$. 计算采用 99×300 的均匀网格, 使用4个CPU核, 对应4个并行分区, 该分区由JAUMIN内置的第三方软件包Par-Metis^[57]产生. 针对I型裂纹扩展问题, 将初始裂纹放置悬臂梁中心轴上, 长度为 $a = 2.05$. 设定裂纹总共扩展10步, 每一步裂纹扩展长度为0.21.

同时计算串行与并行结果, 裂纹扩展如图27所示,

图 25 (网络版彩图)稳定裂纹精度测试. (a) 一致质量矩阵+隐格式时间积分; (b) 集中质量矩阵+显格式时间积分

图 26 (网络版彩图)双臂梁裂纹扩展. (a) 计算模型; (b) 并行分区

图27(b)中3条竖直曲线表示patch边界. 由于裂纹位于双臂梁的中心轴上, 裂纹动态扩展属于I型裂纹扩展问题, 扩展方向为沿着双臂梁中心线自左向右扩展. 图27结果显示, 裂纹始终沿着悬臂梁中心线上扩展, 并行结果与串行结果完全一致. 由该图还可看出, 裂尖在跨越patch边界时, 得到正确传递, 从而验证并行计算功能. 图28进一步给出裂尖应力强度因子随裂纹扩展的变化

图 27 (网络版彩图)双臂梁I型裂纹扩展时 σ_y 应力场(第0、2、4、6步). (a) 串行裂纹扩展; (b) 并行裂纹扩展

图 28 (网络版彩图)应力强度因子并行和串行结果对比

情况, 并行与串行结果亦完全一致. 该算例验证了并行实现的正确性.

5.2.2 软件鲁棒性验证

选取如图29所示的100条随机裂纹模型, 测试PANDA_Fracture软件的鲁棒性. 方形板尺寸为1单位长度, 裂纹位置、尺寸通过蒙特卡洛方法随机生成. 该模型两端施加单向拉伸应力 σ 作用, 大小为 $\sigma=1$.

计算采用 600×600 的均匀网格, 弹性模量 $E=1000$, 泊松比 $\nu=0.3$. 该测试问题的自由度约为百万量级, 计算在天河II号上完成, 采用4个CPU核完成, 计算时间仅需5.7 min. 计算的 σ_y 应力场如图30所示.

该问题中的裂纹随机分布, 与网格之间具有复杂

图 29 100条随机裂纹计算模型

图 30 (网络版彩图) σ_y 应力场

的几何关系. 尽管如此, 对该模型的计算顺利完成, 说明PANDA_Fracture具有良好的鲁棒性.

5.2.3 软件可扩展性测试

仍采用5.2.1小节中的计算模型, 但网格尺寸取为 1581×1581 , CPU核数分别取为1、4、16、64、256、1024个, 裂纹分别布置1、2、4、8条.

在天河II号上进行加速比测试, 测试结果如图31所示. 从图中可看出, 加速比随CPU核数呈上升趋势, 具有一定的可扩展性. 在1024核时, 加速比取得最大值, 接近80倍, 但此时效率仅接近10%, 仍需进一步提高. 此外, 图中裂纹条数对于加速比具有一定影响. 这是因为裂纹切割单元会造成矩阵条件数的改变, 从而影响收敛速度, 进而影响求解时间.

5.3 PBX 9502炸药压缩断裂实验模拟

裂纹问题是制约含能材料结构可靠性与安全性评

估置信度的关键因素. 本节所模拟实验算例为美国洛斯阿拉莫斯国家实验室(LANL)所做的PBX 9502炸药微孔洞诱发裂纹的断裂实验^[58]. 该实验所使用的试件构型如图32所示. 从图中可知试件加载情况及其尺寸: 实验中模型底端(bottom)固定, 顶端(top)施加准静态位移荷载(图中 δ); 试件中孔的尺寸 $d=19.05$ mm, 其他尺寸如图所示. 实验分析试件孔洞周围的裂纹萌生与扩展发生过程^[58].

数值模拟的计算参数为: 弹性模量 $E=2300$ MPa, 泊松比 $\nu=0.4$, 断裂韧性 $K_{IC}=12.2$ MPa mm^{1/2}, 抗拉强度 $\sigma_t=8.0$ MPa. 通过数值模拟, 分别给出PBX 9502试件的起裂时间、裂纹扩展长度随相对加载位移(δ/H)变化曲线、位移场分布(5个时刻: A~E), 与实验结果进行详细对比. 起裂时间对比见表4; 裂纹扩展长度对比如图33所示; 位移场分布对比如图34所示.

由表4可知, 数值计算的起裂时间与实验结果相当, 误差仅为5%左右. 由图33和34可知, 数值模拟的裂纹扩展长度、位移场均与实验结果符合很好. 图33

图 31 (网络版彩图) PANDA_Fracture加速比测试

图 32 PBX 9502试件及试件尺寸(单位: mm)^[58]

表 4 试件起裂时间对比

对比		起裂位移(%)	起裂时刻(s)
数值结果	顶部	0.306	11.0
	底部	0.310	11.2
实验结果	顶部	0.319	11.5
	底部	0.325	11.9

图 33 (网络版彩图)裂纹扩展长度随相对加载位移变化曲线(图中实验数据来源于文献^[58])

中的初始裂纹扩展速度, 实验为1.76 mm/s, 数值模拟为1.73 mm/s, 误差仅为1.7%.

对PBX 9502炸药带孔试件压缩断裂实验的模拟表明: PANDA_Fracture软件在裂纹起始时间、裂纹扩展速度、裂纹扩展长度均与实验结果符合很好, 表明了软件很好的数值预测精度.

6 结论

为将扩展有限元法应用于大规模工程应用中, 基于无额外自由度单位分解插值格式, 给出改进型扩展

图 34 (网络版彩图)竖直方向位移场结果对比. (a) 实验^[58]; (b) 模拟

有限元法(IXFEM). 基于IXFEM, 在高性能数值模拟软件开发框架JAUMIN上, 通过软件设计与并行实现, 开发裂纹分析并行软件PANDA_Fracture.

通过理论算例、数值算例与实验算例, 对该软件精度与可靠性进行系统性验证. 上述算例验证表明, PANDA_Fracture具有如下特色:

- 1) 通过引入无额外自由度裂尖加强, 实现了静、动力裂纹问题高精度分析. 由于裂尖加强的引入, 使得裂纹扩展长度可以任意.
- 2) 不仅支持动力学裂纹问题显式求解, 还支持动力学裂纹问题隐式迭代求解. 算例表明, 动力学裂纹隐式迭代求解精度更高.
- 3) 支持任意多裂纹问题的大规模高效求解.
- 4) 支持上千CPU核可扩展计算.

目前进行中的工作包括: 1) 多裂纹扩展、汇合以及相互竞争; 2) 三维裂纹算法与软件实现.

参考文献

- 1 Belytschko T, Black T. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *Int J Numer Meth Eng*, 1999, 45: 601–620
- 2 Moës N, Dolbow J, Belytschko T. A finite element method for crack growth without remeshing. *Int J Numer Meth Eng*, 1999, 46: 131–150
- 3 Daux C, Moës N, Dolbow J, et al. Arbitrary branched and intersecting cracks with the extended finite element method. *Int J Numer Meth Eng*, 2000, 48: 1741–1760
- 4 Belytschko T, Moës N, Usui S, et al. Arbitrary discontinuities in finite elements. *Int J Numer Meth Eng*, 2001, 50: 993–1013
- 5 Gravouil A, Moës N, Belytschko T. Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets-Part II: Level set update. *Int J Numer Meth Eng*, 2002, 53: 2569–2586
- 6 Pourmoghaddas R, Mashayekhi M. Improvement of the extended finite element method for ductile crack growth. *Mater Sci Eng-A*, 2012, 551: 255–

- 7 Singh I V, Mishra B K, Bhattacharya S, et al. The numerical simulation of fatigue crack growth using extended finite element method. *Int J Fatigue*, 2012, 36: 109–119
- 8 Afshar A, Daneshyar A, Mohammadi S. XFEM analysis of fiber bridging in mixed-mode crack propagation in composites. *Compos Struct*, 2015, 125: 314–327
- 9 Shen Y, Lew A J. A locking-free and optimally convergent discontinuous-Galerkin-based extended finite element method for cracked nearly incompressible solids. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2014, 273: 119–142
- 10 Bui T Q, Zhang C. Analysis of generalized dynamic intensity factors of cracked magnetoelectroelastic solids by X-FEM. *Finite Elem Anal Des*, 2013, 69: 19–36
- 11 李录贤, 王铁军. 扩展有限元法(XFEM)及其应用. *力学进展*, 2005, 35: 5–20
- 12 方修君, 金峰. 基于ABAQUS平台的扩展有限元法. *工程力学*, 2007, 24: 6–10
- 13 余天堂. 模拟三维裂纹问题的扩展有限元法. *岩土力学*, 2010, 31: 3280–3285
- 14 江守燕, 杜成斌. 动载下缝端应力强度因子计算的扩展有限元法. *应用数学和力学*, 2013, 34: 586–597
- 15 陈金龙, 战楠, 张晓川. 基于扩展有限元法的裂尖场精度研究. *计算力学学报*, 2014, 31: 425–430
- 16 束一秀, 李亚智, 姜薇, 等. 基于扩展有限元的多裂纹扩展分析. *西北工业大学学报*, 2015, 33: 197–203
- 17 郑东健, 霍中艳, 李波. 基于XFEM的拱坝裂缝变形监控混合模型. *中国科学: 技术科学*, 2012, 42: 213–219
- 18 黄西成, 李尚昆, 魏强, 等. 基于XFEM与Cohesive模型分析PBX裂纹产生与扩展. *含能材料*, 2017, 25: 694–700
- 19 庄茁, 柳占立, 成斌斌, 等. 扩展有限元法. 北京: 清华大学出版社, 2012
- 20 余天堂. 扩展有限单元法—理论、应用及程序. 北京: 科学出版社, 2014
- 21 Dassault Systèmes Simulia Corp. Abaqus 6.9 Documentation, Analysis User's Manual, Section 10.6.1. 2009
- 22 ANSYS Inc. ANSYS Mechanical APDL Fracture Analysis Guide. 2015
- 23 吴圣川, 吴玉程. ALOF——新一代三维疲劳裂纹扩展分析软件. *计算机辅助工程*, 2011, 20: 136–140
- 24 Babuška I, Melenk J M. The partition of unity method. *Int J Numer Meth Eng*, 1997, 40: 727–758
- 25 Melenk J M, Babuška I. The partition of unity finite element method: Basic theory and applications. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1996, 139: 289–314
- 26 Tian R, Yagawa G, Terasaka H. Linear dependence problems of partition of unity-based generalized FEMs. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2006, 195: 4768–4782
- 27 Béchet E, Minnebo H, Moës N, et al. Improved implementation and robustness study of the X-FEM for stress analysis around cracks. *Int J Numer Meth Eng*, 2005, 64: 1033–1056
- 28 Laborde P, Pommier J, Renard Y, et al. High-order extended finite element method for cracked domains. *Int J Numer Meth Eng*, 2005, 64: 354–381
- 29 Chahine E, Laborde P, Renard Y. Crack tip enrichment in the XFEM using a cutoff function. *Int J Numer Meth Eng*, 2008, 75: 629–646
- 30 Babuška I, Banerjee U. Stable generalized finite element method (SGFEM). *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2012, 201–204: 91–111
- 31 Gupta V, Duarte C A, Babuška I, et al. A stable and optimally convergent generalized FEM (SGFEM) for linear elastic fracture mechanics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2013, 266: 23–39
- 32 Gupta V, Duarte C A, Babuška I, et al. Stable GFEM (SGFEM): Improved conditioning and accuracy of GFEM/XFEM for three-dimensional fracture mechanics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2015, 289: 355–386
- 33 Belytschko T, Chen H, Xu J, et al. Dynamic crack propagation based on loss of hyperbolicity and a new discontinuous enrichment. *Int J Numer Meth Eng*, 2003, 58: 1873–1905
- 34 Menouillard T, Réthoré J, Combescure A, et al. Efficient explicit time stepping for the extended finite element method (X-FEM). *Int J Numer Meth Eng*, 2006, 68: 911–939
- 35 Réthoré J, Gravouil A, Combescure A. An energy-conserving scheme for dynamic crack growth using the eXtended finite element method. *Int J Numer Meth Eng*, 2005, 63: 631–659
- 36 Prabel B, Combescure A, Gravouil A, et al. Level set X-FEM non-matching meshes: Application to dynamic crack propagation in elastic-plastic media. *Int J Numer Meth Eng*, 2007, 69: 1553–1569
- 37 Combescure A, Gravouil A, Gregoire D, et al. X-FEM a good candidate for energy conservation in simulation of brittle dynamic crack

- propagation. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2008, 197: 309–318
- 38 Tian R. Extra-dof-free and linearly independent enrichments in GFEM. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2013, 266: 1–22
 - 39 Wen L F, Tian R. An extra dof-free and well conditioned XFEM. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Computational Methods*. Cambridge, UK, 2014. 437
 - 40 Tian R, Wen L. Improved XFEM—An extra-dof free, well-conditioning, and interpolating XFEM. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2015, 285: 639–658
 - 41 Wen L, Tian R. Improved XFEM: Accurate and robust dynamic crack growth simulation. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2016, 308: 256–285
 - 42 田荣, 文龙飞. 改进型XFEM进展. *计算力学学报*, 2016, 33: 469–477
 - 43 Liu Q K, Zhao W B, Cheng J, et al. A programming framework for large scale numerical simulations on unstructured mesh. In: *Proceedings of the 2nd IEEE International Conference on High Performance and Smart Computing (IEEE HPSC)*. New York, 2016. 310–315
 - 44 莫则尧, 刘青凯, 赵伟波, 等. 并行自适应非结构网格应用编程框架软件. 中国专利, 2016SR263704. 2016-09-18
 - 45 史光梅, 何颖波, 吴瑞安, 等. 面向对象有限元并行计算框架PANDA. *计算机辅助工程*, 2010, 19: 8–14
 - 46 牛红攀, 谢珂, 王景焘, 等. PANDA结构静力与振动大规模并行分析软件. 中国专利, 2016SR265255. 2016-09-19
 - 47 Rice J R. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. *J Appl Mech*, 1968, 35: 379–386
 - 48 Yu H, Wu L, Guo L, et al. Investigation of mixed-mode stress intensity factors for nonhomogeneous materials using an interaction integral method. *Int J Solids Struct*, 2009, 46: 3710–3724
 - 49 Erdogan F, Sih G C. On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear. *J Basic Eng*, 1963, 85: 519–525
 - 50 Song J H, Areias P M A, Belytschko T. A method for dynamic crack and shear band propagation with phantom nodes. *Int J Numer Meth Eng*, 2006, 67: 868–893
 - 51 Khoei A R. *Extended finite element method: Theory and applications*. Weinheim: John Wiley & Sons, 2015
 - 52 石路杨, 余天堂. 多裂纹扩展的扩展有限元法分析. *岩土力学*, 2014, 35: 263–272
 - 53 Cheung Y K, Woo C W, Wang Y H. A general method for multiple crack problems in a finite plate. *Comput Mech*, 1992, 10: 335–343
 - 54 Tada H, Paris P C, Irwin R. *The Stress Analysis of Cracks Handbook (Third Edition)*. New York: ASME Press, 2000
 - 55 Fries T P. A corrected XFEM approximation without problems in blending elements. *Int J Numer Meth Eng*, 2008, 75: 503–532
 - 56 Freund L B. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1990
 - 57 Schloegel K, Karypis G, Kumar V. Parallel static and dynamic multi-constraint graph partitioning. *Concurrency Computat-Pract Exper*, 2002, 14: 219–240
 - 58 Liu C, Thompson D G. Crack initiation and growth in PBX 9502 high explosive subject to compression. *J Appl Mech*, 2014, 81: 101004

Implementations of parallel software for crack analyses based on the improved XFEM

WANG LiXiang^{1,2}, WEN LongFei^{1,2}, WANG JingTao^{1,2} & TIAN Rong^{1,2}

¹ CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China;

² Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China

The extended finite element method (XFEM) has been a state-of-the-art tool for crack analyses. However, the method has been long hampered in engineering applications by two major issues. One is the global stiffness matrix in static analyses being highly ill-conditioned. The other one is the inconsistent energy transfer between the neighboring time steps in dynamic analyses. The first issue leads to bad convergence in large-scale engineering applications where iterative equation solvers are mainly used. The second issue causes poor accuracy and difficulties in implementations of dynamic analyses. In order to overcome these two issues, the improved XFEM is proposed, based on an extra-dof-free PU approximation. Thereby, parallel software for crack analyses, PANDA_Fracture, is developed based on the proposed method with an HPC framework for numerical applications—JAUMIN. As numerical examples indicate, the software PANDA_Fracture has several distinguished features. Firstly, it introduces highly accurate crack tip enrichment and supports arbitrary crack propagation. Secondly, it supports both implicit and explicit dynamic analyses. Thirdly, it supports multiple crack analyses with high efficiency. Fourthly, it scales up to one thousand CPU cores for high-performance simulations.

improved XFEM, crack propagation, fracture mechanics, JAUMIN, high-performance computing, PANDA

doi: [10.1360/N092017-00367](https://doi.org/10.1360/N092017-00367)