

## Energy Release Rate of Plane Quasicrystals with Cracks Determined by Path-Independent E-Integral

WU Xiang-fa<sup>1</sup>, FAN Tian-you<sup>1</sup>, AN<sup>2</sup> Dong-Mai

- (1. Research Center for Materials Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081)
- (2. Basic Division, Beijing Institute of Machinery, Beijing 100085, China)

### Abstract

This paper presented a novel FEM-method to solve the mixed boundary equations of plane quasicrystals (including point groups of 5, 5m, 8mm, 12mm) by transforming the elastic equilibrium equations of plane quasicrystals into the variation of a generalized energy functional of quasicrystals. A novel path-independent integral, namely *E-integral*, was proposed to determine the energy release rates (ERRs) of crack growth in quasicrystals. Numerical example for the ERRs of these plane quasicrystals was provided, which show that the numerical ERRs given in this work covers the analytic ones in literature very well. It further shows that the ERRs of plane quasicrystals with cracks are higher than their corresponding materials without phase fields.

**Key words** Quasicrystals; variation; FEM; path-independent integral; E-integral; energy release rate (ERR)

# 用路径守恒积分计算平面准晶 裂纹扩展的能量释放率

吴祥法<sup>1</sup>, 范天佑<sup>1</sup>, 安冬梅<sup>2</sup>

(1. 北京理工大学材料科学研究中心, 北京 100081; 2. 北京机械工业学院基础部, 北京 100085)

**摘 要:** 将准晶(包括点群 5, 5m, 8mm, 10, 10mm, 12mm)弹性边值问题化为广义能量泛函的变分问题, 建立了求解准晶弹性变形的有限元法, 并提出了含裂纹准晶的路径守恒  $E$ -积分, 指出  $E$ -积分在数值上等于准晶裂纹扩展的能量释放率, 作为实例, 计算了平面五次、八次、十二次对称准晶裂纹扩展的能量释放率, 数值计算表明准晶中路径积分具有较好的守恒性, 同时数值结果表明准晶中相位子场的出现使准晶裂纹扩展的能量释放率增大。

**关键词:** 准晶; 变分; 有限元; 路径守恒积分;  $E$ -积分; 能量释放率

**中图分类号:** TG111.2 **文献标识码:** A

## 0 前 言

1984 年 Shechtman 等<sup>[1]</sup>人在锰铝合金中发现了晶体学上不允许的具有五次旋转对称轴的二十面体结构, 后来被称为准晶体<sup>[2]</sup>, 接着我国科学家郭可信等<sup>[3]</sup>在钛钒镍合金中也发现了相同的结构, 随后又发现了平面五次、八次、十次和十二次对称准晶。准晶具有长程准周期平移对称性和晶体学上不允许的取向对称性。准晶的发现是凝聚态物理的一个重要进展, 引起了物理学界和材料科学界的重视, 近十多年来不同领域的科学工作者从不同角度对准晶的物理、力学乃至数学方法等进行了广泛的研究。就准晶的力学性能研究来看, 丁棣华等<sup>[4]</sup>关于准晶的普遍弹性理论是一个很重要的成果, 为进一步研究准晶的变形和破坏规律奠定了理论基础。新近发表的文献<sup>[5]</sup>对这些问题作了深入的评述与全面的总结。准晶发现不久, 人们就观察到准晶中存在位错等缺陷<sup>[6]</sup>, 缺陷对准晶的力学性能有显著的影响。国内外物理学家发展了 Fourier 变换和 Green 函数法分析了准晶的位错问题, 得到了许多成果, 例如文献<sup>[7, 8]</sup>。文<sup>[9]</sup>把经典弹性理论中的位移函数推广到准晶弹性理论, 同时结合使用 Fourier 变换, 得到点群 5m, 10 的平面准晶的刃型位错解, 其结果与文献<sup>[7, 8]</sup>相同。文<sup>[10]</sup>与即将发表的文<sup>[11]</sup>把经典弹性理论中的应力函数法推广到准晶弹性理论, 使用 Fourier 变换与对偶积分方法, 求解了平面五次对称准晶中 Griffith 裂纹问题; 采用位移函数、Fourier 变换和对偶积分方程法也得到了平面准晶中 Griffith 裂纹问题的解<sup>[12]</sup>。以上方法都是解析方法, 虽然解析方法有许多优点, 但也存在很大的局限性。

本文以平面准晶为例, 发展了经典弹性的变分原理<sup>[13]</sup>将平面准晶的变形控制方程等效地转化为一个广义能量泛函的变分, 进而采用简洁的有限元法给出了其在任意给定边界条件下域内应力场和位移场的完整数值解法; 进一步推广了断裂力学中的  $J$ -积分守恒原理<sup>[14]</sup>, 提出了含裂纹平面准晶中的路径守恒积分, 称为  $E$ -积分(Eshelby), 指出  $E$ -积分在物理意义上相

134-09

当于准晶裂纹扩展的能量释放率,并结合准晶的有限元法给出了准晶裂纹扩展能量释放率的数值计算方法。最后作为例子,本文给出了含I型中心 Griffith 裂纹平板的平面五次、八次、十二次对称准晶在平面应变条件下的裂纹扩展能量释放率的数值计算结果,数值结果表明 E-积分具有较好的路径守恒性,且准晶中相位子场的出现使准晶裂纹扩展的能量释放率增大。

### 1 准晶弹性的基本方程与变分原理

平面准晶是由具有旋转对称轴的平面准周期晶格沿第三维方向周期堆积而成的<sup>[5]</sup>。在弹性力学上,出现与弹性声子场相耦合的相位子场。对于平面准晶,当我们研究其一个对称平面时,其旋转对称轴垂直于这个对称平面且沿着这个平面没有其他的对称轴,将这个平面取为 x-y 平面,声子和相位子的位移分别记为  $u_i, w_i (i = 1, 2)$ , 与  $u_i$  相对应的为普通的应力场  $\sigma_{ij}$ ; 与  $w_i$  相对应的为相位子应力场  $H_{ij}$ , 这里  $i = 1, 2, j = 1, 2$ 。平面准晶(包括点群 5, 5m, 8mm, 10, 10mm, 12mm)的弹性力学基本方程<sup>[4]</sup>为:

#### 1 平衡方程

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,j} + f_i &= 0 \\ H_{ij,j} + g_i &= 0 \end{aligned} \quad x_i \in \Omega \quad (1.1)$$

其中  $f_i$  和  $g_i$  分别对应于声子场和相位子场的单位体积力。

#### 2 应变-位移关系(或变形几何关系)

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \\ w_{ij} &= w_{i,j} \end{aligned} \quad x_i \in \Omega \quad (1.2)$$

其中  $\epsilon_{ij}$  为声子场应变张量,  $w_{ij}$  为相位子场应变张量。

#### 3 应力-应变关系(或广义 Hooke 定理)

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijkl}\epsilon_{kl} + R_{ijkl}w_{kl} \\ H_{ij} &= K_{ijkl}w_{kl} + R_{kl ij}w_{kl} \end{aligned} \quad x_i \in \Omega \quad (1.3)$$

其中  $C_{ijkl}$  为声子场弹性常数张量,  $K_{ijkl}$  为相位子场弹性常数张量,  $R_{ijkl}$  为声子场-相位子场耦合弹性常数张量。

#### 4 应力边界条件

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}n_j &= \bar{p}_i \\ H_{ij}n_j &= \bar{h}_i \end{aligned} \quad x_i \in \Gamma_t \quad (1.4)$$

其中  $\bar{p}_i$  为边界上给定的面力,  $\bar{h}_i$  为边界上对应于相位子场的广义面力。

#### 5 位移边界条件

$$\begin{aligned} u_i &= \bar{u}_i \\ w_i &= \bar{w}_i \end{aligned} \quad x_i \in \Gamma_u \quad (1.5)$$

其中  $\bar{u}_i$  与  $\bar{w}_i$  为边界上给定的位移。

准晶混合边值问题求解的有限区域为  $\Omega$ ,  $\Gamma$  为求解域  $\Omega$  的边界, 并且  $\Gamma = \Gamma_t + \Gamma_u$ , 这里  $\Gamma_t$  为应力已知的边界,  $\Gamma_u$  为位移已知的边界。

利用点群理论可以将平面准晶(点群 5, 5m, 8mm, 10, 10mm, 12mm)式(1.3)中的弹性常数张量  $C_{ijkl}, K_{ijkl}$  和  $R_{ijkl}$  用下列的独立的弹性不变量表示<sup>[4]</sup>如下:

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (1.6)$$

向在扩位  
对称轴  
出现了  
用平移  
描述了物  
理、力  
晶的普  
。新近  
准晶  
Fourier  
经典  
10的  
性质理  
五次  
平面  
也存

效地  
条件下  
提出  
上相

$$K_{ijkl} = (K_1 - K_2 - K_3)\delta_{ik}\delta_{jl} + K_2\delta_{ij}\delta_{kl} + K_3\delta_{il}\delta_{jk} + 2(K_2 + K_3)(\delta_{i1}\delta_{j2}\delta_{k1}\delta_{l2} + \delta_{i2}\delta_{j1}\delta_{k2}\delta_{l1}) \quad (1.7)$$

$$R_{ijkl} = R_1(\delta_{i1} - \delta_{i2})(\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) + R_2[(1 - \delta_{ij})\delta_{kl} + \delta_{ij}(\delta_{i1} - \delta_{i2})(\delta_{k1}\delta_{l2} - \delta_{k2}\delta_{l1})] \quad (1.8)$$

其中  $\lambda, \mu$  为普通晶体的 Lamé 常数,  $K_1, K_2, K_3$  为相位子场弹性常数,  $R_1, R_2$  为声子场-相位子场耦合弹性常数。

式(1.7), (1.8)中相位子场的弹性常数  $K_1, K_2, K_3$  及声子场-相位子场耦合弹性常数  $R_1$  及  $R_2$  的不同取值分别对应于不同对称类型的平面准晶, 如  $R_1 > 0, R_2 = 0, K_1 > 0, K_2 > 0$  且  $K_2 + K_3 = 0$  对应的为平面五次对称准晶(点群 5m);  $R_1 > 0, R_2 = 0, K_1 > 0, K_2 > 0, K_3 > 0$  对应的为平面八次对称准晶(点群 8mm);  $R_1 = 0, R_2 = 0, K_1 > 0, K_2 > 0, K_3 > 0$  对应的为平面十二次对称准晶(点群 12mm);  $R_1 > 0, R_2 > 0, K_1 > 0, K_2 > 0$  且  $K_2 + K_3 = 0$  对应的为平面五次对称准晶(点群 5)等等。

平面准晶的弹性变形问题可归结为在边界条件(1.4)~(1.5)下求解方程组(1.1)~(1.3), 对于在一般条件下直接寻求此类方程边值问题的解析解是极其困难的。这里将研究其基于变分原理的数值解法, 给出用有限元求解此类力学问题的通用数值方法, 并利用它来分析平面准晶裂纹扩展能量释放率的数值计算。

对于准晶弹性的静力学问题, 这里发展弹性力学中的最小势能原理<sup>[13]</sup>建立准晶弹性问题的广义能量泛函, 将准晶弹性偏微分方程组的混合边值问题的求解转化为一个广义能量泛函的变分, 进而采用有限元方法寻求其数值解。

准晶弹性的势能原理: 对于具有足够光滑性并满足应变-位移关系式(1.2)和位移边界条件(1.5)的一切  $u_i, w_i$  使准晶势能泛函

$$\Pi = \int_{\Omega} A d\Omega - \int_{\Omega} (f_i u_i + g_i w_i) d\Omega - \int_{\Gamma_f} (\bar{p}_i u_i + \bar{h}_i w_i) d\Gamma \quad (1.9)$$

为极小的解, 则必满足应力平衡方程(1.1)和应力边界条件(1.3)。且这个条件是充分必要的。式(1.9)中:

$$\left. \begin{aligned} A &= \int_0^{\epsilon_{ij}} \sigma_{kl} d\epsilon_{kl} + \int_0^{w_{ij}} H_{kl} d w_{kl} = F^u + F^w + F^{uw} \\ F^u &= \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl} \\ F^w &= \frac{1}{2} K_{ijkl} w_{ij} w_{kl} \\ F^{uw} &= R_{ijkl} \epsilon_{ij} w_{kl} \end{aligned} \right\} \quad (1.10)$$

其中  $A$  为准晶的弹性应变能密度,  $F^u, F^w, F^{uw}$  分别对应于准晶的声子场应变能密度、相位子场应变能密度和声子场-相位子场耦合应变能密度,  $\Omega$  为准晶混合边值问题的求解区域,  $\Gamma_f$  为求解区域  $\Omega$  上应力已知的边界。准晶弹性势能原理的证明见文[15]。

对于实际存在的线性或非线形准晶弹性体, 准晶弹性的势能原理要求准晶服从材料弹性稳定性, 也即准晶的应力-应变弹性矩阵是正定的。对于平面五次对称准晶, 其独立的弹性常数为  $\lambda, \mu, K_1, K_2, R_1$ , 文[7]指出当材料弹性常数满足  $\lambda + \mu > 0, \mu > 0, K_1 > 0, \mu K_1 > R_1^2$  时, 准晶满足弹性稳定性条件; 对于平面八次对称准晶, 其独立的弹性常数为  $\lambda, \mu, K_1, K_2, K_3, R_1$ , 可

以证明其弹性稳定性条件为  $\lambda + \mu > 0, \mu > 0, K_1 > 0, \mu K_1 > R_1^2, K_2 + K_3 > 0$ ; 对于平面十二次对称准晶, 其独立的弹性常数为  $\lambda, \mu, K_1, K_2, K_3$ , 其弹性稳定性条件为  $\lambda + \mu > 0, \mu > 0, K_1 > 0, K_1 + K_2 + K_3 > 0$ 。对于实际存在的其他对称类型的平面准晶当其弹性常数满足应力-应变弹性矩阵为正定矩阵时, 则此对称类型准晶也必是弹性稳定的。

下面利用变分形式(1.9)建立准晶弹性的有限元求解格式。

## 2 平面准晶弹性问题的有限元法

对于平面准晶, 基于准晶弹性的势能原理可对求解域进行单元划分, 当采用四节点四边形等参数单元时, 其势能泛函式(1.9)在求解域上经离散化后可得对应的有限元代数方程组。

$$[K]\{U\} = \{R\} \quad (2.1)$$

其中  $[K], \{R\}$  分别为单元刚度矩阵  $[K]^e$  及单元载荷矢量  $\{R\}^e$  按有限元组集原则组集所得的总刚度矩阵和总载矢量;  $\{U\}$  为求解域的整体节点位移矢量。其中单元刚度矩阵  $[K]^e$  及单元载荷矢量  $\{R\}^e$  可表示为:

$$[K]^e = \iint_{\Omega^e} [B]^T [D] [B] \Delta dx dy \quad (2.2)$$

$$\{R\}^e = \iint_{\Omega^e} [H]^T \begin{Bmatrix} f \\ g \end{Bmatrix} \Delta dx dy + \int_{\Gamma^e} [H]^T \begin{Bmatrix} p \\ h \end{Bmatrix} \Delta d\Gamma \quad (2.3)$$

式(3.2), (3.3)中  $\Omega^e$  为单元面积;  $\Gamma^e$  为含已知边界力的单元边界;  $\Delta$  为单元厚度, 平面应变时  $\Delta$  取 1.0;  $[B] = [B_1, B_2 \dots B_m]$  为单元的应变矩阵,  $[B] = [L][H]$ ,  $[L]$  为微分算子矩阵;  $[H] = [H_1, H_2 \dots H_m]$  为插值矩阵,  $m$  为单元节点数, 这里取为 4;  $[D]$  为平面准晶的弹性系数矩阵

$$[D] = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & R_1 & R_1 & R_2 & -R_2 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & -R_1 & -R_1 & -R_2 & R_2 \\ 0 & 0 & 2\mu & 2R_2 & 2R_2 & -2R_1 & 2R_1 \\ R_1 & -R_1 & 2R_2 & K_1 & K_2 & 0 & 0 \\ R_1 & -R_1 & 2R_2 & K_2 & K_1 & 0 & 0 \\ R_2 & -R_2 & -2R_1 & 0 & 0 & K_1 + K_2 + K_3 & K_3 \\ -R_2 & R_2 & 2R_1 & 0 & 0 & K_3 & K_1 + K_2 + K_3 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

$$[L] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix}, \quad [H_i] = \begin{bmatrix} H_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_i \end{bmatrix} \quad (i = 1, 2, \dots, 4) \quad (2.5)$$

式(3.3)中  $\{f, g\}^T = \{f_{1x}, f_{1y}, g_{1x}, g_{1y}, \dots, f_{4x}, f_{4y}, g_{4x}, g_{4y}\}$ ,  $\{p, h\}^T = \{p_{1x}, p_{1y}, h_{1x}, h_{1y}, \dots, p_{4x}, p_{4y}, h_{4x}, h_{4y}\}$  分别为单元声子场和相位子场的单位体力矢量及单位边界力矢量。

准晶单元 Gauss 积分点的应力计算公式为

$$\begin{Bmatrix} \sigma \\ H \end{Bmatrix}^e = [S] \begin{Bmatrix} u \\ w \end{Bmatrix}^e = [D][B] \begin{Bmatrix} u \\ w \end{Bmatrix}^e = [D][L][H] \begin{Bmatrix} u \\ w \end{Bmatrix}^e \quad (2.6)$$

式中  $[S] = [D][B] = [D][L][H]$  为单元应力矩阵;  $\{\sigma, H\}^{eT} = \{\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{xy}, H_{xx}, H_{yy}, H_{xy}, H_{yx}\}$  为单元声子场和相位子场的应力矢量;  $\{u, w\}^{eT} = \{u_{1x}, u_{1y}, w_{1x}, w_{1y}, \dots, u_{4x}, u_{4y}, w_{4x}, w_{4y}\}^e$  为单元节点的声子场和相位子场的位移矢量。

### 3 平面准晶的路径守恒积分(E 积分)及其应用

路径守恒积分在断裂力学中具有重要的意义,这里研究准晶中的路径守恒积分、其物理意义及其数值求解方法。

在静态情形下这里推广 Rice<sup>[14]</sup>1968 年提出的  $J$ -积分守恒原理,建立含裂纹准晶体的路径守恒积分,即  $E$ -积分(Eshelby, J. D.),

$$E = \int_{\Gamma} A dx_2 - \int_{\Gamma} [t_i \frac{\partial u_i}{\partial x_1} + h_i \frac{\partial w_i}{\partial x_1}] d\Gamma \quad (3.1)$$

式(3.1)中  $A$  为准晶的弹性应变能密度,  $t_i$  及  $h_i$  为所取积分围线  $\Gamma$  上的声子场和相位子场面积力,如图 1。(3.1)式的路径守恒性证明略。观察  $E$ -积分的形式(3.1)可知,当不计相位子场时,则  $E$ -积分就是  $J$ -积分。

式(3.1)中的物理意义为:  $E$ -积分数值上等于准晶体裂纹单位扩展的势能释放率,即

$$E = \frac{\partial \Pi}{\partial x_1} \quad (3.2)$$

式中  $\Pi$  为由(1.9)式所定义的含裂纹准晶体的弹性势能。证明略。

这里利用式(3.1)及(3.2)分析平面准晶中裂纹尖端的应力奇异性及准晶中裂纹扩展能量释放率的数值计算方法。

#### 3.1 平面准晶裂纹尖端的奇异性分析

由平面准晶的路径守恒积分式(3.1),当积分路径  $\Gamma$  取为以裂尖为中心、 $r$  为半径的圆弧时,则  $E$ -积分可以表示为

$$\begin{aligned} E &= \int_{\Gamma} A dx_2 - \int_{\Gamma} [t_i \frac{\partial u_i}{\partial x_1} + h_i \frac{\partial w_i}{\partial x_1}] d\Gamma \\ &= \int_{\Gamma} [A n_2 - \sigma_{ij} n_j \frac{\partial u_i}{\partial x_1} - H_{ij} n_j \frac{\partial w_i}{\partial x_1}] r d\theta \end{aligned} \quad (3.3)$$

$r$  位于  $K$  控制区内,由  $E$ -积分的物理意义可知  $E$ -积分数值上等于准晶弹性体裂纹单位扩展的弹性势能释放率,因此  $E$  为有限值。由于  $E$  是路径无关的,则令  $r \rightarrow 0$  时,有

$$\sigma_{ij} \varepsilon_{kl}, \quad \sigma_{ij} w_{kl}, \quad H_{ij} W_{kl}, \quad H_{ij} \varepsilon_{kl} \propto O\left(\frac{1}{r}\right) \quad (3.4)$$

对于线弹性准晶体,其应力-应变关系是线性的,如式(1.3)所示,其中  $C_{ijkl}, K_{ijkl}, R_{ijkl}$  为准晶场声子场和相位子场的弹性系数。由式(3.4)可知,  $\sigma_{ij}, H_{ij}, \varepsilon_{ij}, w_{ij}$  在裂纹尖端具有相同的奇

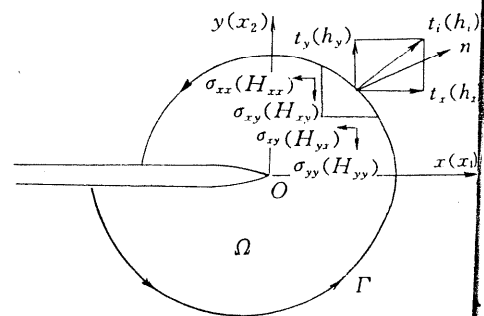


图1 平面准晶中的路径守恒积分(E-积分)

阶数,其奇异性阶数为  $-\frac{1}{2}$ ,这一结论与文[10]采用直接积分法得到的平面五次对称准晶裂纹尖端应力场、应变场的奇异性阶数相同,进一步可以用  $E$ -积分研究非卸载情况下准晶的塑性裂纹尖端奇异场。

## 2 平面准晶裂纹扩展能量释放率的数值计算

基于平面准晶的有限元法及  $E$ -积分守恒原理可以研究平面准晶裂纹扩展能量释放率的数值计算方法。

由第2节建立的有限元数值计算格式,可以得到在任意外载作用下计算域内每个有限元单元内各个 Gauss 积分点上的声子场应力应变和相位子场的应力应变。利用式(3.1)计  $E$ -积分时可以让绕裂尖的积分围线  $\Gamma$  穿过单元的 Gauss 积分点,并且使积分围线远离裂尖(这样可以避免计算精度较差的裂尖复杂变形区),那么  $E$ -积分的数值就等于沿围线  $\Gamma$  的 Gauss 数值积分,其表达式为

$$\begin{aligned}
 E &= \int_{\Gamma} A dx_2 - \int_{\Gamma} (t_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + h_i \frac{\partial w_i}{\partial x_j}) d\Gamma \\
 &= \int_{\Gamma} [\frac{1}{2} (\sigma_{11}\epsilon_{11} + \sigma_{22}\epsilon_{22} + 2\sigma_{12}\epsilon_{12} + H_{11}w_{11} + H_{22}w_{22} + H_{12}w_{12} + H_{21}w_{21}) - \\
 &\quad (\sigma_{11} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \sigma_{21} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + H_{11} \frac{\partial w_1}{\partial x_1} + H_{21} \frac{\partial w_2}{\partial x_1})] dx_2 + \\
 &\quad \int_{\Gamma} [\sigma_{21} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \sigma_{22} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + H_{21} \frac{\partial w_1}{\partial x_1} + H_{22} \frac{\partial w_2}{\partial x_1}] dx_1 \\
 &= \sum_{n=1}^{N_e} \sum_{m=1}^{N_g} H_m \{ [\frac{1}{2} (\sigma_{11}\epsilon_{11} + \sigma_{22}\epsilon_{22} + 2\sigma_{12}\epsilon_{12} + H_{11}w_{11} + \\
 &\quad H_{22}w_{22} + H_{12}w_{12} + H_{21}w_{21}) - (\sigma_{11} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \sigma_{21} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + H_{11} \frac{\partial w_1}{\partial x_1} + H_{21} \frac{\partial w_2}{\partial x_1})]_m (\frac{\partial x_2}{\partial \xi})_m + \\
 &\quad [\sigma_{21} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \sigma_{22} \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + H_{21} \frac{\partial w_1}{\partial x_1} + H_{22} \frac{\partial w_2}{\partial x_1}]_m (\frac{\partial x_1}{\partial \xi})_m \}
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

中,  $N_e$  为围线穿过的单元数,  $N_g$  为围线所穿过单元 Gauss 积分点个数,  $H_m$  为计算的权数,  $\xi$  表示单元的局部坐标  $-1 \leq \xi \leq 1$ 。

## 3.3 平面准晶材料裂纹扩展能量释放率数值计算例子

如图2,考虑含中心 Griffith 裂纹的平面准晶矩形板的 I 型拉伸问题,其中矩形板长  $l = 100\text{mm}$ ,宽  $b = 20\text{mm}$ ,裂纹长为  $2a$ ,其中  $a = 5.0\text{mm}$ ;外载  $p$  取均布拉力,其中  $p/\mu = 0.01$  ( $\mu$  为 Lamé 常数);有限元利用结构外载的对称性取  $1/4$  结构,其单元划分如图4所示,采用了 507 个 4 节点等参数协调单元,计算网格的节点数

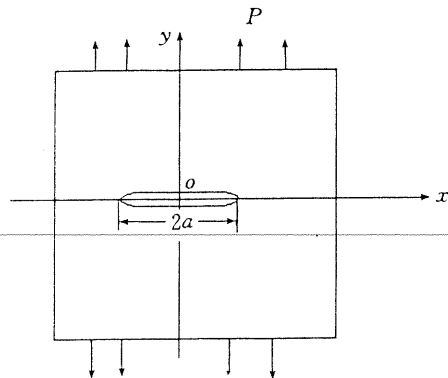


图2 含 Griffith 裂纹准晶矩形板的 I 型拉伸

560. 对于不同对称类型的准晶和普通金属材料其不同相位子场弹性系数  $K_1, K_2, K_3$  以及声

子场 - 相位子场耦合弹性系数  $R_1, R_2$  所对应的 4 条不同的积分路径(如图 3) 计算得到的  $E$  分值如表 1 所示, 其中各材料常数取其与 Lamé 系数  $\mu$  的不同比值, Poisson 比取 0.33.

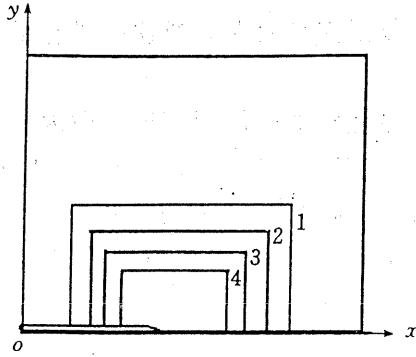


图 3 含中心 Griffith 裂纹准晶矩形平板裂纹尖端的积分围路

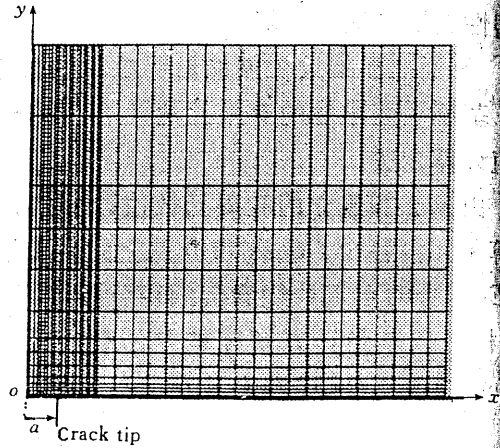


图 4 准晶矩形平板的有限元计算网格(1/4)

对于普通各向同性材料含 Griffith 裂纹的无限平面 I 型拉伸问题, 文[16]给出在平面应变情况下裂纹扩展的能量释放率公式为

$$G_I = \frac{1 - \nu^2}{E} \pi a \rho^2 = \frac{1 - \nu^2}{E} \pi K_I^2 \quad (4.1)$$

式中  $\nu$  为 Poisson 比,  $E$  为杨氏弹性模量,  $K_I$  为应力强度因子。按理论公式(4.1)给出的本题的计算值如表 8.1.

对于平面五次对称准晶(点群 5m)含 Griffith 裂纹的无限平面的 I 型拉伸问题, 文[11]给出平面应变情况下裂纹扩展的能量释放率公式为

$$G_I = \frac{(\lambda + 2\mu)K_I - R_1^2}{2(\lambda + \mu)(\mu K_I - R_1^2)} \pi a \rho^2 \quad (4.2)$$

式(4.2)中  $\lambda, \mu$  为准晶声子场的 Lamé 系数,  $K_I$  为准晶相位子场弹性系数,  $R_1$  为准晶声子场相位子场耦合弹性系数, 按理论公式(4.2)给出的本问题的计算值如表 1.

现有的解析结果都是关于无限平面的裂纹问题, 但当数值计算的计算区域远大于裂纹尺寸时, 有限域的数值结果可以与理论解作比较。从表 1 给出的不同对称类型平面准晶在四条同围线上的数值积分与已知的分析结果比较可以看出, 本文给出的  $E$ - 积分数值结果具有较好的路径守恒性, 其与理论解较接近。从给出的方法和数值计算例子可以看出用  $E$ - 积分路径守恒原理计算准晶材料裂纹扩展的能量释放率是可行的。

另一方面, 对于相同几何尺寸和相同外载作用下的平面准晶与普通金属的  $E$ - 积分从表 1 给出的数值结果可以看出, 平面准晶由于相位子场的出现使其裂纹扩展的能量释放率增加。平面五次对称准晶(点群 5)由于出现了第二耦合弹性系数而使其能量释放率大于平面五次对称准晶(点群 5m)。由于计算  $E$ - 积分时施加的外载为声子场载荷, 而平面十二对称准晶不存在耦合弹性系数所以其裂纹扩展的能量释放率等同于普通金属材料裂纹扩展的能量释放率。



得到的  
. 33:

表 1 含中心 Griffith 裂纹不同对称类型平面准晶材料与  
普通金属材料 I 型拉伸的  $E$ - 积分值比较表

晶体类型	弹性常数 $K_1, K_2, K_3, R_1, R_2$ 与 Lamé 系数 $\mu$ 的不同比值, 泊松比 $\nu = 0.33$					不同积分围线上的 $E$ - 积分值( $10^{-4}$ ) $\cdot \mu$					
	$K_1/\mu$	$K_2/\mu$	$K_3/\mu$	$R_1/\mu$	$R_2/\mu$	1	2	3	4	平均值	分析解
普通金属	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	5.3474	4.9999	5.1483	5.2180	5.1783	5.2622
准晶(点群 5m)	0.8	0.6	-0.6	0.1	0.0	5.4695	5.1313	5.2614	5.3584	5.3052	5.3119
准晶(点群 5)	0.8	0.6	-0.6	0.1	0.1	5.6460	5.3118	5.4242	5.5505	5.4831	(无)
准晶(点群 8mm)	0.8	0.6	0.4	0.1	0.0	5.4405	5.0976	5.2336	5.3231	5.2737	(无)
准晶(点群 12mm)	0.8	0.6	0.4	0.0	0.0	5.3474	4.9999	5.1483	5.2180	5.1783	(无)

参 考 文 献

格(1/4)  
出在平面  
(4.  
给出的本  
页,文[11]  
] Ding Di-hua,  
(4.  
] 胡承正,杨文革,  
] Socolar J E S,  
大于裂纹  
晶在四条  
果具有较  
积分路径  
] Li Xianfang,  
积分从表  
女率增加,  
面五次对  
晶不存在  
放率。

Shechtman D, Blech I, Gratias D, Cahn J W. Metallic phase with long-rang orientation order and no translational symmetry[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, 53(20):1951~1953.

Levine D, Steinhardt P J. Quasicrystals: a new class of ordered structure[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1984, 53(20):2477~2480.

Zhang Z, Ye H Q, Kuo K H. A new icosahedral phase with m35 symmetry[J]. *Phil. Mag. A*, 1985, 52(6):L49~L52.

Ding Di-hua, Yang Wenge, Hu Chengzheng, Wang Renhui. Generalized elasticity theory of quasicrystals[J]. *Phys. Rev.*, 1993, B48(10):7003~7010.

胡承正,杨文革,王仁卉,丁隼华. 准晶的对称性和物理性质[J]. *物理学进展*, 1997, 17(4):345~375.

Socolar J E S, Lenbensity T C, Steihardt P T. Phonons, Phasons and dislocation in quasicrystals[J]. *Pyhs. Rev.*, 1986, B34:3345~3360.

Piali De, Robert A. Pelcovits. Linear elasticity theory of pentagonal quasicrystals[J]. *Phys. Rev.*, 1987, B35:8609~8620.

Ding Di-hua, Wang Renhui, Yang Wenge, Hu Changzheng, Qin Yuelin. Elasticity theory of straight dislocations in quasicrystals[J]. *Phil. Mag. Lett.*, 1995, 72(5):353~358.

Li Xianfang, Fan Tainyou. A new method for solving elastic problem of some planar quasicrystals[J]. *Chinese Phys. Lett.* 1998, 15(4):278~280.

范天佑,郭玉翠. 平面五次对称准晶中一类混合边值问题的交替解法与直接积分法[J]. *中国科学(A辑)*, 1997, 27(6):553~565.

Guo Yucui, Li Xianfang, Fan Tianyou. Stress intensity factor of pentagonal quasicrystals[J]. *Int. J. Fract.*, 1998(in press).

Li Xianfang, Fan Tianyou, Sun Yingfei. A decagonal quasicrystal with a Griffith crack[J]. *Phil. Mag. A*, 1998(have been accepted).

胡海昌. 弹性力学的变分原理及其应用[M]. 北京:科学出版社,1981.

Rice J R. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks[J]. *J. Appl. Mech.*, 1968, 35:379~386.

- [15] 吴祥法,范天佑. 准晶弹性的变分原理和数值模拟[J]. 中国科学, A 辑, 1998(待发表).  
[16] 范天佑. 断裂力学基础[M]. 南京:江苏科学技术出版社, 1978.

## Energy release rate of plane quasicrystals with crack determined by path-independent E-integral

WU Xiang-fa<sup>1</sup>, FAN Tian-you<sup>1</sup>, AN Dong-mei<sup>2</sup>

(1. Research Center of Materials Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

2. Basic Division, Beijing Institute of Machinery, Beijing 100085, China)

### Abstract

This paper firstly presents the FEM-method to solve the mixed boundary problem equations of plane quasicrystals (including point group 5, 5m, 8mm, 10, 12mm) transforming the elastic equilibrium equations of plane quasicrystals into the variation of kind of general potential function and to determine the energy release rate (ERR) of plane quasicrystals with crack by extended path independent J-integral, namely E-integral. numerical example caring about the ERRs of those plane quasicrystals is provided and numerical results show that the ERRs given numerically are equal to the analytic ones very well. The ERRs of plane quasicrystals with crack are greater than those materials with coupled phason field.

**Key words:** quasicrystals; variation; FEM; path-independent integral; E-integral; energy release rate