



基于物质点法的多尺度计算

刘岩*, 张雄

清华大学航天航空学院, 北京 100084

* 联系人, E-mail: yan-liu@tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2017-02-06; 接受日期: 2017-02-21; 网络出版日期: 2017-06-05

国家自然科学基金(编号: 11472153, 11102097, 10872107)和北京高等学校青年英才计划(编号: YETP0111)资助项目

摘要 多尺度计算方法近年来受到了广泛关注, 如何实现分子模拟方法与连续介质模拟方法的平滑过渡, 以及如何高效、逼真地构建微细观尺度计算模型, 是多尺度计算中需重点解决的问题. 近二十年来迅速发展的无网格粒子类方法, 特别是物质点法, 以其优异的性质, 在众多领域内得到了关注与成功应用. 本文综述了近年来物质点法及其衍生方法在多尺度计算领域的发展情况, 包括分子动力学与物质点法的无缝连接、高频波反射抑制、微细观结构建模等方面的算法理论与应用情况, 展示出基于物质点法的多尺度计算方法的优势.

关键词 多尺度计算, 无网格粒子类方法, 物质点法, 波传播, 耦合, 微细观建模

PACS: 02.70.Ns, 46.15.-x, 62.50.+p, 81.05.Zx

1 引言

很多复杂问题, 如断裂问题、湍流问题、强冲击下物质的相变问题等, 本质上涉及宏细微观多个尺度, 客观上要求采用多尺度计算方法进行分析. 近年来随着对微纳米科技探索的不断深入, 对适用于多个尺度的高效、准确数值方法的需求也在迅速增加. 分子动力学(Molecular Dynamics, MD)、分子静力学等分子模拟方法虽能从底层原子尺度给出复杂问题的相关机制, 适用于连续介质假设失效情况下的计算分析, 但其计算量巨大, 可用时空尺度严重受限.

一种自然的解决方案是将分子模拟方法与基于

连续介质力学的计算方法(以下简称为连续介质计算方法), 如有限元法、有限体积法、有限差分法、无网格法等, 结合起来, 实现对更大时空尺度问题的模拟. 分子模拟-连续介质结合的多尺度计算方法通常可以分为两大类: 一类是分子模拟方法和连续介质计算方法分别负责不同尺度上过程的求解, 小尺度上的分子模拟结果为大尺度上的连续介质计算提供数值本构, 而大尺度上的计算结果为小尺度上的计算提供约束条件, 此类方法通常被称为串行(Sequential)多尺度方法、层级(Hierarchical)多尺度方法或层进(Upscaling)多尺度方法; 另一类是对连续介质假设可能失效的核心区域和远场区域分别采用分子模拟方法和连续介质计算方法, 期望通过

引用格式: 刘岩, 张雄. 基于物质点法的多尺度计算. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070014

Liu Y, Zhang X. Multiscale computation based on material point method (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070014, doi: 10.1360/SSPMA2017-00023

空间上的耦合构建能够求解更大空间尺度的计算方法, 此类方法通常被称为并发(Concurrent)或者耦合(Coupling)多尺度方法.

另外, 近年来受到广泛关注的多种新型材料, 如泡沫材料、纳米复合材料等, 其突出的宏观力学性能多依赖于较为复杂的微细观结构. 构建真实的微细观结构模型, 是研究新型材料宏观性能的最有效途径之一. 但传统网格类方法在构建模型时受困于网格连接关系, 不易贴近真实情况, 所构建的模型对于预报宏观整体性质尚可, 但对于极端载荷条件下材料的局部破坏过程不易描述. 20世纪90年代中期兴起的无网格粒子类方法(Meshfree Particle Methods)在构建复杂模型时便利得多, 且不存在网格畸变等问题, 易于描述极端载荷下的大变形和断裂过程.

在众多无网格粒子类方法中, 物质点法(Material Point Method, MPM)^[1,2]以其独到的优势, 在包括多尺度计算在内的诸多领域中受到关注, 并发展和派生出了新型的多尺度计算方法. 本文将对基于物质点法的多尺度计算方法加以全面总结和评述, 指出物质点法的独特优势对于多尺度计算的促进作用.

2 物质点法概述

20世纪90年代中期, Sulsky等人^[3,4]对计算流体动力学的质点网格法(PIC)进行改造, 使其适用于固体力学问题的计算, 提出了物质点法. 为文章完整起见, 下面对物质点法的基本理论及其优点加以扼要介绍, 方法细节读者可以参考近年来出版的物质点法专著^[1,2].

物质点法采用双重离散, 即同时使用一组质点(称为物质点)和一套背景网格. 质点携带所有物理量, 其运动表征了物质的运动与变形(拉格朗日描述); 背景网格固定在空间上或者以指定方式运动(欧拉描述), 用于空间导数的计算和动量方程的求解. 在每一时间步中, 物质点上的变量, 如质量、动量、应力等, 映射到背景网格节点上, 形成节点动量方程. 求解节点动量方程后, 利用节点增量更新物质点的位置、速度等变量, 并计算物质点的应变

增量, 从而通过本构关系更新物质点上的应力. 在每一时间步内, 物质点与背景网格绑定一起变形. 每一时间步计算完成时, 抛弃已变形的背景网格, 在下一时间步重新使用未变形的背景网格.

上述计算流程使物质点法兼具拉格朗日类方法和欧拉类方法的优点, 易于跟踪物质界面和历史变量, 避免了网格畸变. 物质点法通常采用显式时间积分, 但其临界时间步长取决于背景网格尺寸, 而非质点间距. 即使物质发生了极大的变形, 也不会由于质点间距的压缩而使临界时间步长急剧减小, 这一点明显优于显式拉格朗日有限元法和大部分显式无网格粒子类方法. 物质点法的基本计算流程保证了单值速度场, 即使不采用任何接触算法, 也不会出现物体间的穿透, 亦即物质点法流程内禀非滑移、不可分离的接触算法. 作为一种无网格粒子类方法, 物质点法的前处理非常便利, 很适合离散复杂构型的物体. 这些优点使得物质点法非常适合于多尺度计算, 特别是涉及到复杂结构、大变形和断裂破碎的多尺度问题.

此外, 物质点法与其他数值方法具有紧密的联系, 这使其具有与其他方法结合发展新型多尺度计算方法的良好基础. 物质点法可以视为采用了质点积分、每步重构规则背景网格的一种特殊有限元法, 张雄及其合作者^[5-7]基于此构建了多种物质点有限元法. 物质点法在计算中所采用的背景网格使其便于与有限差分等方法结合^[8]. 物质点法所基于的质点、网格双重离散的思想也可以借鉴到多尺度计算方法中.

3 物质点法和分子动力学方法结合的多尺度计算方法

3.1 基于物质点法的耦合多尺度方法

将MPM作为连续介质区域的求解方法, 与MD方法耦合, 可以构建具有良好性质的耦合多尺度计算方法. Guo和Yang^[9]、Komanduri及其合作者^[10,11]最先发展了MD-MPM耦合方法. 在上述方法中, MD区域和MPM区域交界面处均使用了过渡区(或称为握手区), 过渡区里原子和物质点相互重

合,且背景网格尺寸在过渡区内也减小到晶格常数数量级.在过渡区内,MD区域一侧的原子为MPM区域提供边界条件,MPM区域一侧的物质点为MD区域的原子提供原子力的计算环境.

标准物质点法通常在全场采用同一尺寸背景网格,但在MD-MPM耦合方法中,过渡区和远场的背景网格尺寸相差很大.为实现不同尺寸背景网格的连接,Guo和Yang^[9]、Komanduri及其合作者^[10,12]均采用了多级背景网格,在不同级背景网格连接处建立悬节点的形函数.

与MD区域相比,连续介质区域离散尺寸通常要大得多,若不能妥善处理原子运动高频分量在两区域界面处的反射,将可能严重影响MD区域计算结果,甚至导致非物理现象的发生.连续介质本构通常不具备原子势函数的非局部性,若不加特殊处理,将在界面处产生虚假力.高频运动分量的反射抑制与局部-非局部性质的协调,是包括MD-MPM耦合方法在内的各种耦合多尺度方法需要解决的核心问题.He等人^[13-15]基于光滑分子动力学(Smoothed Molecular Dynamics, SMD)方法很好地解决了这两个核心问题.SMD方法是Liu等人^[16]借鉴物质点法的思想所提出的一种分子模拟方法,下面先介绍SMD方法及其改进,再介绍基于SMD方法的MD-MPM耦合方法.

SMD方法在MD的基础上,引入了一套背景网格,计算中不再直接求解原子运动方程,而是将原子质量、原子力映射到背景网格节点上,建立背景网格节点方程.在求解节点方程后,再由节点增量插值更新原子位置和速度.由于自由度数量巨大,MD计算往往采用显式积分方案,其临界时间步长受限于高频振动,通常只能在飞秒量级,严重限制了MD方法的应用时间尺度.SMD方法通过原子与背景网格节点间的映射/插值过程,把控制临界时间步长的因素转化为背景网格尺寸,因此可以采用比MD方法大得多的时间步长,甚至可以高一个量级以上^[16].王汉奎等人^[17]发展了SMD方法的并行计算方案.与MPM类似,SMD方法的背景网格尺寸是计算精度的重要影响因素,Wang等人^[18]发展了背景网格尺寸自适应变化的计算方案,保证了计算精度和效率的良好平衡.

SMD方法的映射/插值过程抑制了高频运动分量,但对于背景网格能够表达的低频分量仍能较好描述,因此整体精度与MD结果相近^[16].对于高频分量的抑制使得SMD方法不易描述局部原子乱序,局部精度受到影响.He等人^[19]提出了交替光滑分子动力学(AltSMD)方法以改善SMD方法的精度.AltSMD方法充分利用了SMD结果是MD结果的良好近似这一性质,在SMD计算过程中检测其与MD结果的偏离程度,一旦偏离过大,即以SMD结果为出发点进行MD弛豫,直到偏离程度的判据满足要求.AltSMD方法实质是以SMD计算为预估步、MD弛豫为校正步的广义预估-校正方法.纳米压痕、纳米试件拉伸等算例表明^[19],AltSMD方法仅用很少量的MD弛豫步就可以获得与MD结果吻合良好的力-位移曲线和局部原子构型.由于SMD和MD计算流程非常相似,只是SMD每步中需要原子和节点间的映射/插值过程,因此SMD计算和MD弛豫的转换很方便,几乎不需要消耗计算量.

另一种改善SMD方法局部精度的方案是将其与MD方法进行空间耦合^[13,16].两种方法的耦合也非常便利,可通过SMD区域和MD区域原子间的相互作用自动体现,SMD区域的背景网格尺寸不需要在MD-SMD界面附近降低到晶格常数.Liu等人^[16]发展了MD-SMD耦合方法的多时间步长积分方案,以充分发挥SMD区域可以采用很大时间步长的优势.He等人^[13]实现了MD区域和SMD区域的自动转化,在计算开始时背景网格覆盖所有区域,在每步中根据自适应准则自动判断每个单元内具体采用MD计算还是SMD计算.压痕等问题的计算结果表明,自适应MD-SMD耦合方法能够很好地捕捉位错的发射过程,也解决了耦合多尺度方法需事先判断MD使用区域所带来的问题.He等人^[13]在MD-SMD界面附近的狭窄过渡区内对原子运动高频分量施加如下的阻尼力,成功地抑制了高频分量的反射

$$F_i^d = -\alpha m_i \dot{r}_i^{\text{high}} / \Delta t, \quad (1)$$

式中下标*i*为原子序号, m_i 为原子质量, Δt 为MD时间步长, α 为系数. \dot{r}_i^{high} 为原子速度的高频分量,可借助

延展到过渡区内的SMD背景网格近似得到

$$\dot{\mathbf{r}}_i^{\text{high}} = \dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{r}}_i^*, \quad (2)$$

其中 $\dot{\mathbf{r}}_i$ 为映射前的原子速度, $\dot{\mathbf{r}}_i^*$ 为节点速度插值结果, 式(2)利用了SMD计算流程中的映射/插值过程对高低频分量的自动分解, 计算简洁高效. He等人 [13]详细讨论了 α 的选取, 并给出了推荐值的计算方式. 图1所示为含有高频分量的一维波从MD区域传播到SMD区域的计算结果对比 [13], 未采用任何界面处理方案的结果有大约68%的能量被反射回MD区域; 而当采用上述高频波抑制方案时, 即使过渡区宽度仅为3倍原子间距, 反射能量已下降一个量级; 当过渡区宽度为9倍原子间距时, 仅有初始能量的0.66%残留在MD区域内.

SMD方法和MPM都使用了背景网格, 因此可以通过背景网格实现两者的无缝耦合 [14,15]. SMD-MPM耦合方法在SMD区域和MPM区域交界处插入过渡区(图2中的 Ω_E), 该区域内同时布置虚原子和物质点, 认为原子描述和连续介质描述在该区域内均成立. 设置虚原子的目的是, 防止在计算SMD区域内原子的受力时出现虚假力, 因此 Ω_E 的宽度仅需不小于原子势函数的截断半径. SMD-MPM交界面附近的背景网格节点力、节点质量、节点动量等包括SMD区域原子的贡献和MPM区域质点的贡献, 但虚原子仅对节点力有贡献, 不参与节点质量和动量的计算, 以防止重复计算.

以SMD方法作为桥梁, 可构造无缝耦合的MD-SMD-MPM多尺度方法 [14,15], 如图2所示, 其中 Ω_T 为前述用于抑制高频波反射的MD-SMD过渡区. MD-SMD界面处理方案有效防止了原子运动高频分量在界面处的反射, SMD-MPM耦合方案避免了连续介质局部性和原子力非局部性差异所导致的虚假力. SMD和MPM区域的网格尺寸, 以及MPM区域的质点间距, 在MD区域边界附近不需要下降到晶格常数量级, SMD区域边界附近的MPM质点也不需要放置在晶格点上.

上述AitSMD方法和MD-SMD自适应耦合方法都需要判据自动判断SMD计算步骤(或区域)和MD计算步骤(或区域)之间的相互转化. He等人 [13,19]发展了基于原子力、原子累积位移、中心对称数 [20]

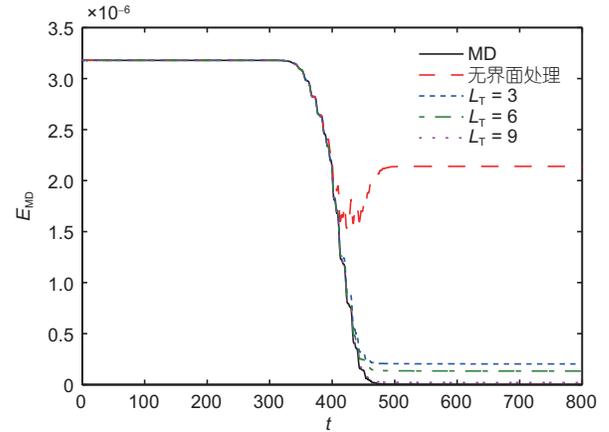


图1 (网络版彩图)一维波传播问题在采用不同过渡区尺寸时的MD区域能量变化 [13]

Figure 1 (Color online) The variation of energy in MD region for one-dimensional wave propagation problem with various sizes of transition region [13].

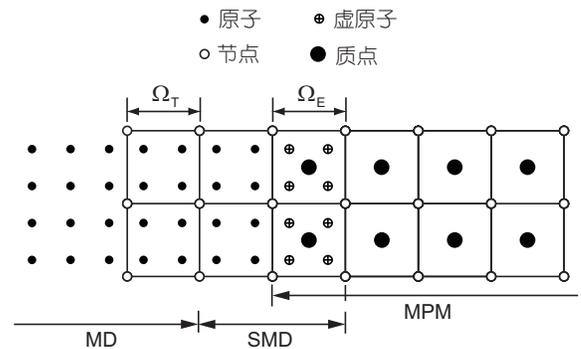


图2 MD-SMD-MPM耦合多尺度方法示意图 [14]

Figure 2 The MD-SMD-MPM coupling multiscale method [14].

(Centro-Symmetry Parameter, CSP)的多种判据, 其中CSP判据检测背景网格单元内的原子CSP值, 原子力和原子位移判据分别检测映射步骤之前的原子力/位移与节点插值等效力/位移之间的差值, 当判据值超出阈值时, SMD计算步骤(或区域)需转化为MD计算步骤(或区域). CSP判据在大部分情况下精度最高, 但计算量较大; 原子力、原子位移判据充分利用了SMD计算流程中的映射/插值过程, 计算量要小得多, 同时也具有较好的计算精度. 为避免MD和SMD之间的转换过于频繁, 可采用单元平均值作为判据的计算值.

物质点法的双重离散性质也使其易于和

介观尺度的数值方法相耦合. Jiang等人^[21]提出了耗散粒子动力学(Dissipative Particle Dynamics, DPD)和MPM耦合的多尺度方法. DPD-MPM耦合方法在全场均布置背景网格, DPD粒子力也集成到背景网格节点上, DPD粒子的运动也由节点变量更新; DPD区域和MPM区域之间设置过渡区域, 过渡区域内的物质点参与DPD粒子力的计算. Ma等人^[22]将MPM首先与位错动力学耦合, 再与MD方法耦合, 分析了压痕问题中位错的传播.

3.2 基于物质点法的层级多尺度方法

Ayton等人^[23]在分析脂双层的性质时, 发展了非平衡态分子动力学(NEMD)和MPM结合的层级多尺度方法. 他们通过NEMD计算获得输运系数, 然后用于MPM计算, 再由MPM结果设定NEMD计算所需的密度, 这样反复在宏观计算间传递信息直到计算结束. Borodin等人^[24]先通过MD计算获得聚合物及其界面的粘弹性参数, 再通过MPM模拟弛豫过程, 获得整个纳米复合材料的粘弹性性质.

超高速撞击过程通常会产生产生极高的温度和压力, 不易确定状态方程参数. Liu等人^[25]通过大量MD模拟, 得到不同温度和压力下的状态点, 基于这些状态点获得状态方程参数, 再通过MPM模拟获得超高速撞击下材料的动态响应和相变过程.

在前述DPD-MPM耦合多尺度方法中, Jiang等人^[21]通过引入层级多尺度方法以更精确地给出DPD粒子力的参数, 这些参数是通过遗传算法, 粗粒化拟合MD势函数得到的.

4 微细观尺度的物质点建模与模拟研究

4.1 复合材料微细观结构建模方法及其应用

对于具有复杂内部微细观结构的复合材料, 建立其微细观结构的质点模型通常较为便利, 易于通过变化微细观结构参数, 研究各种参数对复合材料宏观性质的影响. Xue等人^[26]基于物质点模型研究了纳米颗粒及其与基体的界面对聚合物基复合材料薄膜渗透扩散的增强作用, 该复合材料的微观结构由初始随机分布的纳米颗粒在相互作用力的作用

下弛豫平衡得到. 尽管颗粒分布随机, 还要考虑颗粒-基体交界面的离散, 但该微观结构仍然可以方便地进行物质点离散. Xue等人^[27]还针对PBX9501炸药, 发展了通过物质点法研究高填充度复合材料粘弹性性质的方案. 由于炸药的的特殊性, 通过细观结构模拟获得炸药的宏观性质是非常理想的途径, 但PBX炸药中填充粒子的尺寸跨度很大, 从微米到毫米不等, 大大增加了细观结构直接模拟的难度. Xue等人^[27]提出仅直接离散大颗粒, 小颗粒和基体通过代表体元获得其平均化性质, 再由大颗粒和等效基体所构成的代表体元获得整个材料的宏观性质, 这种方案在保证较好精度的同时, 避免了直接离散小颗粒所带来的巨大计算量.

碳纳米管增强复合材料具有良好的力学、电学、热学性质, 但含有大量碳管的微观模型并不易构建, 旧有方法或者不能达到真实体分比, 或者碳管只能粗略近似为多个折线段构成, 或者不能满足碳管间非穿透条件. Wang等人^[28]提出了基于物质点法的落管建模方法, 克服了上述不足, 模型逼近真实的碳管增强复合材料微观结构. 落管建模方法首先将各个碳纳米管用物质点离散, 并堆叠在一起; 然后令所有碳管在重力作用下下落并压实, 从而形成增强相的微观结构; 再填充基体质点, 形成最终的复合材料微观结构质点模型. 由于质点布置的便利性, 碳管可以采用更贴近真实构型的曲线形状, 在已有增强相结构基础上添加基体质点也非常方便. 物质点法处理接触过程的优势保证了下落压实过程中大量碳管相互接触的高效模拟, 并有效避免了管之间的相互穿透. Wang等人^[28]基于落管法所建立的模型, 研究了碳管增强复合材料的力学和电学性质, 并利用质点建模的便利性, 深入探讨了管间连接性质对整体性能的影响规律.

4.2 多孔材料细观结构建模方法及其应用

泡沫材料、蜂窝材料等多胞材料细观结构丰富, 且细观结构决定了材料的整体力学性质, 因此构建符合真实情况的细观模型对于多孔材料意义很大. 泡沫材料内孔洞的尺寸和位置分布具有较强的随机性, 传统网格类方法不易建模. 对于开孔泡沫,

虽然可以将胞壁用梁单元离散, 构建细观结构模型, 但在压缩下的大量胞壁接触过程仍不易模拟. 物质点法为研究泡沫的力学性能提供了一条新型途径. Bardenhagen等人^[29]构建了开孔泡沫单胞的物质点模型, 研究了其在压缩载荷下的响应. 利用CT扫描可以获得更加真实的细观结构细节, 而CT扫描结果的像素点又可以很方便地转化为物质点模型中的质点, 因此结合CT扫描是建立反映真实细节的物质点模型的理想方案. 研究者通过微CT扫描, 分别建立了开孔泡沫碳^[30]、闭孔PMI泡沫^[31]、二氧化硅气凝胶^[32]、闭孔泡沫铝^[33,34]的物质点模型, 研究了它们的应力-应变曲线随不同加载速率、不同相对密度等参数的变化规律^[30,32,34], 以及泡沫细观结构对于超高速撞击防护的影响^[33]. 尽管早期的研究对于体材仅采用超弹性材料模型^[29,30], 但仍然可以得到含有弹性段、平台段、压实段的典型的应力-应变曲线, 后期研究表明^[32]对于体材采用弹塑性模型可以获得与实验更加吻合的结果.

蜂窝材料在航天航空领域中被广泛用于承载结构, 若其兼具良好的防护性能(如防护空间轨道碎片的高速撞击), 则可以发展基于蜂窝材料的多功能部件. 当碎片穿透蜂窝夹芯结构的上面板后, 蜂窝芯质对于碎片存在拢聚作用(Channeling Effect), 导致碎片不能散开到更大的范围, 对防护效果产生不利的影响, 因此研究蜂窝夹芯结构的防护性能必须构建芯质细观结构. 虽然蜂窝芯质结构易于进行网格剖分, 但芯质-面板连接处仍需一定的特殊处理, 且高速撞击下芯质胞壁的断裂与破碎过程传统网格类方法不易模拟, 基于物质点法的细观结构建模与模拟可以避免上述困难. Liu等人^[35-38]发展了蜂窝芯质结构的质点建模方法, 基于细观模型的物质点模拟结果与实验结果和经验公式吻合良好^[35]. 基于大量的物质点法模拟, 刘平等人^[35]获得了芯质结构参数对撞击结果的影响规律和经验公式, 并提出了非等距双层蜂窝板、芯质交错双层蜂窝板、多层蜂窝板等改进蜂窝防护结构^[36-38]. 这些改进防护结构通过面板和芯质位置的优化, 使得蜂窝芯质在撞击过程中尽可能多地吸收能量, 在没有使用新材料和增加质量的情况下, 大大提升了蜂窝结构的防护效果^[36-38]. 如图3所示为改进多层防护结构在速度为

5 km/s的碎片撞击下的不同时刻构型^[38], 尽管下面板在撞击后凸起, 但多层芯质吸收了大部分撞击能量, 使得整个防护结构未被穿透.

HMX等多孔含能材料中孔隙的分布和尺寸直接影响着冲击波的传播以及冲击起爆等过程^[39], Xu等人^[39-42]采用物质点法, 从显式含有孔隙的材料细观结构质点模型出发, 对多孔材料的冲击响应进行了大量研究. Xu等人^[40]研究了单个孔洞在冲击波下的坍塌, 以及射流和热点的产生, 考察了孔隙尺寸和材料屈服应力的影响. 他们进一步生成了随机布置孔隙的模型^[39,41,42], 模拟了应力波在多孔材料中反射、绕射并叠加形成复杂波形的过程, 给出了密度、压力、温度的分布和演化, 研究了加载速度、孔隙度、平均孔隙尺寸等参数的影响规律. 采用物质点法大大简化了多孔模型建模过程^[41], 只要确定孔隙中心位置和尺寸, 再将孔隙所含物质点挖去即可.

4.3 其他基于物质点法的微细观尺度问题研究

Shen等人^[43]在分析晶界对多晶材料塑性强化的影响时, 构建了含有多个晶粒的二维物质点模型. 该模型在整个区域均匀布点, 仅需分辨出晶粒内部质点和晶界质点即可完成建模, 与传统网格类方法

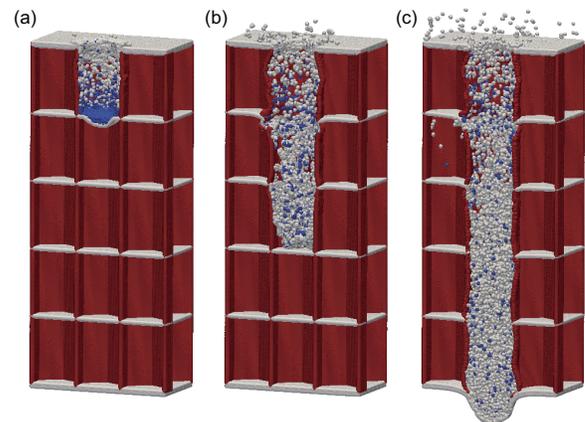


图3 (网络版彩图)改进多层蜂窝防护结构超高速撞击过程的物质点法模拟结果^[38]. (a) $t = 2 \mu\text{s}$; (b) $t = 6 \mu\text{s}$; (c) $t = 30 \mu\text{s}$

Figure 3 (Color online) MPM simulation results of the hyper-velocity impact process of the improved multi-layered honeycomb shielding structure^[38]. (a) $t = 2 \mu\text{s}$; (b) $t = 6 \mu\text{s}$; (c) $t = 30 \mu\text{s}$.

相比大大简化了离散过程. 仿真是研究细胞和细胞群性质的重要手段, 但细胞和细胞群形态非常复杂, 即使采用非结构化网格剖分, 也不易保证网格性质良好. Guilkey等人^[44]对体外培养生成的微血管进行CT扫描, 再将扫描图像转化为物质点模型, 模拟了微血管及细胞外基质在机械加载下的响应, 模型物质点数量达1360万. Li等人^[45]在两接触表面的物质点之间引入相互作用力, 研究了纳米颗粒黏着接触规律及表面粗糙度对其的影响.

5 结论与展望

物质点法以其良好的性质受到了广泛关注, 本文综述了基于物质点法的多尺度计算工作, 初步展现了物质点法在多尺度分析领域中的可观潜力. 基于物质点法的多尺度计算方法主要体现出如下优点: (1) 作为一种无网格粒子类方法, 物质点法中的质点布置方便, 易于实现与分子动力学方法的连接; (2) 基于物质点法思想的光滑分子动力学方法大大

拓展了分子模拟的临界时间步长, 基于光滑分子动力学方法的耦合多尺度方法高效准确地解决了界面高频波反射抑制、局部-非局部差异弥合等耦合多尺度方法的核心问题; (3) 构建材料复杂微细观结构的物质点模型非常便利, 易于通过微细观结构模型的直接模拟获得材料的宏观动力学性质; (4) 物质点法易于描述超大变形、断裂破碎和大量接触过程, 非常适合分析微细观结构对于强冲击载荷作用下材料响应的影响规律.

基于物质点法的多尺度计算方法尚处于初始发展阶段, 在理论、算法构建、具体应用等方面都远未成熟, 需要全面深入的研究, 特别在如下方向值得重点探讨: (1) 构建分子动力学和物质点法的完全自适应时空耦合算法, 实现从原子层次出发的复杂问题的高效准确多尺度模拟; (2) 结合有限元等其他方法的成果, 发展含有薄壁构件、细长纤维的材料细观结构的高效建模与分析方法; (3) 基于大规模多尺度模拟, 获得高应变率、高压、高温下材料的动态响应以及多个尺度间的关联机制.

参考文献

- 1 Zhang X, Lian Y P, Liu Y, et al. *Material Point Method (in Chinese)*. Beijing: Tsinghua University Press, 2013 [张雄, 廉艳平, 刘岩, 等. 物质点法. 北京: 清华大学出版社, 2013]
- 2 Zhang X, Chen Z, Liu Y. *The Material Point Method: A Continuum-Based Particle Method for Extreme Loading Cases*. Amsterdam: Academic Press, 2016
- 3 Sulsky D, Chen Z, Schreyer H L. A particle method for history-dependent materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1994, 118: 179–196
- 4 Sulsky D, Zhou S J, Schreyer H L. Application of a particle-in-cell method to solid mechanics. *Comput Phys Commun*, 1995, 87: 236–252
- 5 Zhang X, Sze K Y, Ma S. An explicit material point finite element method for hyper-velocity impact. *Int J Numer Methods Eng*, 2006, 66: 689–706
- 6 Lian Y P, Zhang X, Liu Y. Coupling of finite element method with material point method by local multi-mesh contact method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2011, 200: 3482–3494
- 7 Lian Y P, Zhang X, Liu Y. An adaptive finite element material point method and its application in extreme deformation problems. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2012, 241–244: 275–285
- 8 Cui X X, Zhang X, Zhou X, et al. A coupled finite difference material point method and its application in explosion simulation. *Comput Model Eng Sci*, 2014, 98: 565–599
- 9 Guo Z, Yang W. MPM/MD handshaking method for multiscale simulation and its application to high energy cluster impacts. *Int J Mech Sci*, 2006, 48: 145–159
- 10 Lu H, Daphalapurkar N P, Wang B, et al. Multiscale simulation from atomistic to continuum-coupling molecular dynamics (MD) with the material point method (MPM). *Philos Mag*, 2006, 86: 2971–2994
- 11 Ma J, Lu H, Wang B, et al. Multiscale simulation using generalized interpolation material point (GIMP) method and molecular dynamics (MD). *Comput Model Eng Sci*, 2006, 14: 101–117
- 12 Ma J, Wang B, Lu H, et al. Multiscale simulations using generalized interpolation material point (GIMP) method and SAMRAI parallel processing. *Comput Model Eng Sci*, 2005, 8: 135–152

- 13 He N, Liu Y, Zhang X. Molecular dynamics-smoothed molecular dynamics (MD-SMD) adaptive coupling method with seamless transition. *Int J Numer Methods Eng*, 2016, 108: 233–251
- 14 He N F. Research on Multiscale Methods Based on Smoothed Molecular Dynamics (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Beijing: Tsinghua University, 2016 [贺年丰. 基于光滑分子动力学方法的多尺度方法研究. 博士学位论文. 北京: 清华大学, 2016]
- 15 He N, Liu Y, Zhang X. Seamless coupling of molecular dynamics and material point method via smoothed molecular dynamics. *Int J Numer Methods Eng*, in press, doi: 10.1002/nme.5543
- 16 Liu Y, Zhang X, Sze K Y, et al. Smoothed molecular dynamics for large step time integration. *Comput Model Eng Sci*, 2007, 20: 177–191
- 17 Wang H K, Zhang X, Liu Y. Parallel smoothed molecular dynamics method and coupling with molecular dynamics (in Chinese). *Chin J Comput Phys*, 2008, 25: 718–724 [王汉奎, 张雄, 刘岩. 并行化光滑分子动力学方法及其与分子动力学的耦合. 计算物理, 2008, 25: 718–724]
- 18 Wang H K, Zhang X, Qiu X M. Adaptive smoothed molecular dynamics for multiscale modeling. *Comp Mater Sci*, 2009, 46: 713–715
- 19 He N, Liu Y, Zhang X. An improved smoothed molecular dynamics method by alternating with molecular dynamics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2015, 296: 273–294
- 20 Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. *Phys Rev B*, 1998, 58: 11085–11088
- 21 Jiang S, Chen Z, Sewell T D, et al. Multiscale simulation of the responses of discrete nanostructures to extreme loading conditions based on the material point method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2015, 297: 219–238
- 22 Ma J, Liu Y, Lu H, et al. Multiscale simulation of nanoindentation using the generalized interpolation material point (GIMP) method, dislocation dynamics (DD) and molecular dynamics (MD). *Computer Model Eng Sci*, 2006, 16: 41–55
- 23 Ayton G, Bardenhagen S G, McMurtry P, et al. Interfacing continuum and molecular dynamics: An application to lipid bilayers. *J Chem Phys*, 2001, 114: 6913–6924
- 24 Borodin O, Bedrov D, Smith G D, et al. Multiscale modeling of viscoelastic properties of polymer nanocomposites. *J Polym Sci B Polym Phys*, 2005, 43: 1005–1013
- 25 Liu Y, Wang H K, Zhang X. A multiscale framework for high-velocity impact process with combined material point method and molecular dynamics. *Int J Mech Mater Des*, 2013, 9: 127–139
- 26 Xue L, Borodin O, Smith G D. Modeling of enhanced penetrant diffusion in nanoparticle-polymer composite membranes. *J Memb Sci*, 2006, 286: 293–300
- 27 Xue L, Borodin O, Smith G D, et al. Micromechanics simulations of the viscoelastic properties of highly filled composites by the material point method (MPM). *Model Simul Mater Sc*, 2006, 14: 703–720
- 28 Wang H K, Liu Y, Zhang X. The carbon nanotube composite simulation by material point method. *Comp Mater Sci*, 2012, 57: 23–29
- 29 Bardenhagen S G, Brydon A D, Guilkey J E. Insight into the physics of foam densification via numerical simulation. *J Mech Phys Solids*, 2005, 53: 597–617
- 30 Brydon A D, Bardenhagen S G, Miller E A, et al. Simulation of the densification of real open-celled foam microstructures. *J Mech Phys Solids*, 2005, 53: 2638–2660
- 31 Daphalapurkar N P, Hanan J C, Phelps N B, et al. Tomography and simulation of microstructure evolution of a closed-cell polymer foam in compression. *Mech Adv Mater Struc*, 2008, 15: 594–611
- 32 Fu B, Luo H, Wang F, et al. Simulation of the microstructural evolution of a polymer crosslinked templated silica aerogel under high-strain-rate compression. *J Non Cryst Solids*, 2011, 357: 2063–2074
- 33 Gong W W, Liu Y, Zhang X, et al. Numerical investigation on dynamical response of aluminum foam subject to hypervelocity impact with material point method. *Comput Model Eng Sci*, 2012, 83: 527–545
- 34 Liu Y, Gong W, Zhang X. Numerical investigation of influences of porous density and strain-rate effect on dynamical responses of aluminum foam. *Comp Mater Sci*, 2014, 91: 223–230
- 35 Liu P, Liu Y, Zhang X. Internal-structure-model based simulation research of shielding properties of honeycomb sandwich panel subjected to high-velocity impact. *Int J Impact Eng*, 2015, 77: 120–133
- 36 Liu P, Liu Y, Zhang X. Improved shielding structure with double honeycomb cores for hyper-velocity impact. *Mech Res Commun*, 2015, 69: 34–39
- 37 Liu P, Liu Y, Zhang X. Simulation of hyper-velocity impact on double honeycomb sandwich panel and its staggered improvement with internal-structure model. *Int J Mech Mater Des*, 2016, 12: 241–254
- 38 Liu P. Investigation of Honeycomb Sandwich Panel Under High-Velocity Impact Using Material Point Method (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Beijing: Tsinghua University, 2015 [刘平. 蜂窝夹芯结构高速撞击的物质点法研究. 博士学位论文. 北京: 清华大学, 2015]

- 39 Xu A G, Zhang G C, Zhang P, et al. Dynamics and thermodynamics of porous HMX-like material under shock. *Commun Theor Phys*, 2009, 52: 901–908
- 40 Xu A G, Pan X F, Zhang G C, et al. Material-point simulation of cavity collapse under shock. *J Phys Condens Matter*, 2007, 19: 326212
- 41 Xu A G, Zhang G C, Ying Y J, et al. Numerical study on porous materials under shock (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2010, 42: 1138–1148 [许爱国, 张广财, 应阳君, 等. 多孔材料冲击特性的数值研究. *力学学报*, 2010, 42: 1138–1148]
- 42 Xu A G, Zhang G C, Li H, et al. Dynamical similarity in shock wave response of porous material: From the view of pressure. *Comput Math Appl*, 2011, 61: 3618–3627
- 43 Shen Y L, Li W, Sulsky D L, et al. Localization of plastic deformation along grain boundaries in a hardening material. *Int J Mech Sci*, 2000, 42: 2167–2189
- 44 Guilkey J E, Hoying J B, Weiss J A. Computational modeling of multicellular constructs with the material point method. *J Biomech*, 2006, 39: 2074–2086
- 45 Li F, Pan J, Sinka C. Modelling adhesive contact between fine particles using material point method. *Mech Mater*, 2011, 43: 157–167

Multiscale computation based on material point method

LIU Yan* & ZHANG Xiong

School of Aerospace Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China

The multiscale computational methods have been paid wide attention to in recent years. Key issues in multiscale computation include the method to realize seamless transition between molecular simulation method and continuum-based simulation method and the method to construct micro- and meso-scopic computational models effectively and realistically. The meshfree particle methods, which have been developing fast in recent twenty years, especially the material point method (MPM), are focused on and successfully applied in many fields owing to the outstanding characteristics. The development of MPM and its derivative methods in the field of multiscale computation in recent years, which includes the algorithms of seamlessly connecting molecular dynamics and MPM, suppressing the reflection of high-frequency motions and modeling micro- and meso-structures, and their applications, is summarized in this paper. The advantages of multiscale computational methods based on MPM are demonstrated.

multiscale computation, meshfree particle methods, material point method, wave propagation, coupling, micro- and meso-scale modeling

PACS: 02.70.Ns, 46.15.-x, 62.50.+p, 81.05.Zx

doi: [10.1360/SSPMA2017-00023](https://doi.org/10.1360/SSPMA2017-00023)