压阻性碳纳米管基复合材料的机电相场断裂建模

Leonel Quinteros[a]、Enrique Garc´ıa-Mac´ıas[a, b]、Emilio Mart´ınez-Pa˜neda[a] ,*

[a]伦敦帝国学院土木与环境工程系，伦敦 *SW7 2AZ*，英国[b]格拉纳达大学结构力学与水力工程系，*Av. Fuentenueva sn 18002*，格拉纳达，西班牙

arXiv:2302.02338v1 [cs.CE] 5 Feb 2023

摘要

本文提出了一种新颖的计算框架，用于模拟发生断裂的自感知碳纳米管（CNT）基复合材料的机电响应。该计算框架将电学—变形—断裂有限元建模与混合微观力学公式相结合。后者用于估算碳纳米管基复合材料的本构性质，包括弹性张量、断裂能、电导率和线性压阻系数。这些性质被输入电—结构耦合有限元模型，该模型基于相场断裂模拟裂纹的演化。该耦合物理问题采用整体式求解方式，并利用拟牛顿算法的稳健性和效率进行求解。本文模拟了二维和三维边值问题，以展示该建模框架在评估缺陷对中尺度和宏尺度智能结构机电响应的影响方面的潜力。案例研究旨在阐明断裂与材料机电响应之间的相互作用，包括参数分析、与实验结果的验证，以及复杂开裂条件（多个缺陷、裂纹合并）的模拟。所展示的数值结果表明，该计算框架高效且稳健，并能够模拟多种结构构型和损伤模式。开发的变形—电学—断裂有限元代码可免费下载。

关键词：碳纳米管（碳纳米管）、有限元分析、相场、压阻效应、智能材料、断裂

*通讯作者。电子邮箱： e.martinez-paneda@imperial.ac.uk（Emilio Mart´ınez-Pa˜neda）

1. 引言

近年来，纳米改性多功能材料（如自感知碳纳米管基复合材料）的发展取得了长足进展，为结构健康监测（SHM）领域开辟了广阔的新机遇。这些材料可用于具有优异刚度/重量比的层合复合材料，以应用于航空结构 [1, 2], 自诊断混凝土 [3–5], 以及智能服装应用 [6], ，这里只列举几例。在碳纳米管基复合材料的多功能特性中，其压阻特性尤其受到科学界的关注，因为它们有望用于开发下一代自诊断材料。在聚合物或水泥基材料中掺入少量碳纳米管后，所得复合材料可通过压阻效应实现应变自感知 [7–10]。这使得智能承载传感器的开发成为可能，此类传感器能够通过电阻率测量监测自身的应变状态 [11]。

压阻性碳纳米管基复合材料建模的一项关键步骤，是估算其机电本构特性。为此，文献中提出了多种方法，其中较为成功的两种是分子动力学（MD） [12, 13] 和基于第一性原理的方法 [14, 15]。然而，这些原子尺度计算在可处理的时间和空间尺度方面受到限制。一种颇具吸引力且计算效率较高的方案是采用平均场均匀化（MFH），以解析或半解析的方式模拟大型复杂复合材料微观结构。此外，模拟中还可以纳入多种细观力学特征，包括碳纳米管的几何性质、填料波曲、团聚和取向分布 [16, 17]。基于这一思路，Hori 和 Nemat-Nasser [18] 采用 Mori-Tanaka 均匀化理论，计算了含纳米夹杂复合材料的弹性模量，并考虑了基体与夹杂物之间存在界面相涂层的情况。Xu 等 [19]估算了椭球形夹杂中软、硬界面相的体积分数。平均场均匀化方法也被用于估算碳纳米管基复合材料的电导率和应变自感知性能。实验表明，由于具有类渗流特性，碳纳米管基复合材料呈现两种主要导电机制 [20, 21]：导电网络和电子跳跃（或量子隧穿） [22, 23]。当体积分数低于称为渗流阈值的临界值时，导电填料彼此相距较远，电子只能通过量子隧穿机制穿越基体的势垒进行传递。当填料浓度

接近渗流阈值时，碳纳米管彼此接触，形成连续的导电通路。后一种机制也称为导电网络机制，会使复合材料的电导率骤增，其数值可能比原始基体相高出几个数量级。Feng 和 Jiang [24] 基于这一物理认识，采用微观力学方法估算碳纳米管-聚合物复合材料的电导率。Garc´ıa-Mac´ıas 等 [25, 26] 也采用了类似策略，估算碳纳米管掺杂水泥基复合材料的电导率和线性压阻系数。关于碳纳米管基复合材料的断裂行为，实验揭示了碳纳米管桥接机制带来的显著增韧效应 [27]。因此，细观力学模型得到扩展，以考虑碳纳米管桥接机制，例如碳纳米管拔出和断裂 [28, 29]。

尽管人们已投入大量精力来估算碳纳米管基复合材料的本构性质，但探讨缺陷对细观和宏观尺度碳纳米管基复合材料机电响应作用的研究却相当有限。Negi 等人 [30]采用扩展有限元法（X-FEM），预测裂纹状缺陷对掺入碳纳米管的复合材料板力学响应的影响。Downey 等人 [31] 提出了一种电阻网络模型，用于近似计算碳纳米管-水泥复合材料中的电场，并开展损伤检测、定位和定量分析。Rodr´ıguez-Tembleque 等人 [32] 采用 X-FEM 研究裂纹对碳纳米管基复合材料传感器电输出的影响。利用压阻材料的单向耦合特性，他们采用顺序两步法 [33]: 首先求解力学问题，再利用所得应变场更新材料的局部电导率，随后求解电场。尽管这些成果令人鼓舞，但众所周知，X-FEM 存在一些计算方面的局限性，例如需要预先定义裂纹的位置和方向、难以处理三维边值问题，以及难以处理多条相互作用的裂纹等。作为替代方案，近年来提出了所谓的相场断裂法，这是一种能够模拟任意几何形状和维度下复杂开裂现象的有效方法 [34–36]。近年来，相场断裂建模因其稳健性、易于实现、在模拟复杂问题（裂纹分叉、合并和复杂轨迹）方面的高度灵活性，以及易于整合至耦合物理模拟中 [37]，而广受关注。近期大量研究将相场法应用于各种材料和断裂现象，为此提供了有力佐证

相场法已应用于多种材料和断裂现象，包括氢脆 [38–40], 、形状记忆合金 [41, 42], 、复合材料 [43, 44], 、冰山崩解 [45, 46], 以及锂离子电池 [47–49]。在碳纳米管基复合材料领域，Quinteros 等人 [50]最近提出了一种结合细观力学与相场断裂的框架。该研究首次纳入了主要的桥接机制，并展示了该框架能够捕捉断裂抗力对填料长径比、取向分布和团聚等微观结构因素的敏感性。然而，该研究仅限于力学现象，碳纳米管基复合材料中的断裂-机电耦合尚待探索。在碳纳米管基复合材料的机电行为中，压阻效应及其与断裂的相互作用尤为重要。相场断裂建模领域尚未对此展开研究，因为机电相场断裂文献仅涉及压电材料和铁电材料 [51–54], ，并评估电场与变形相互作用对断裂的影响。对于压阻材料，研究重点在于机械载荷对材料电阻率的影响，以及材料损伤导致的电导率退化。

在本研究中，我们提出了首个用于模拟碳纳米管基复合材料中变形-电气-断裂现象的计算框架。该框架结合了平均场均匀化、机电压阻建模以及考虑碳纳米管增韧效应的断裂相场描述。第 2 节介绍了用于估算相关电气、力学和断裂性质的平均场均匀化公式。随后，第 3 节对机电相场框架进行了描述，其中包括数值实现的详细信息，以及电渗透率/电导率与相场损伤之间相互作用的相关内容。所得结果见第 4 节。本文研究了五个案例，其中包括一项实验验证，以及对包含多个缺陷的二维/三维几何中各种电致开裂现象的模拟。最后，本文在第 5 节以总结作结。

2. 平均场 碳纳米管基复合材料的机电均匀化 s

本节简要概述用于估算碳纳米管基复合材料本构性质的微观力学建模方法。具体而言，第 2.1 节和第 2.2 节分别介绍机械性质和电学性质的建模。对于

为简化起见，假设碳纳米管笔直、分散良好且取向随机。不过，如其他研究所示（例如见 [25, 50]），可轻松将波曲和团聚效应纳入平均场均匀化模型中。

2.1. 碳纳米管基复合材料的力学性能

2.1.1. 弹性张量

考虑如图 1a 所示的掺杂了碳纳米管的基体相代表性体积单元（RVE）。假设该 RVE 满足三个主要条件：(i) 其中包含足够数量的碳纳米管，使复合材料的整体性能能够得到统计表征；(ii) 碳纳米管的长度 L_{cnt} 和直径 D_{cnt} 保持不变；(iii) 填料的方向是随机的。每根碳纳米管的方向由局部坐标系 $\mathrm{K}' \equiv \{0; x_1' x_2' x_3'\}$ 描述，该坐标系由两个欧拉角 γ_1 和 γ_2 定义。将碳纳米管视为类似于被厚度为 t 的有限弹性涂层包围的均匀夹杂，以模拟基体/填料的载荷传递性能。因此，复合材料被定义为一种三相介质，包括基体、填料和界面相，其弹性张量分别为 $\boldsymbol{C}_m$、$\boldsymbol{C}_p$ 和 $\boldsymbol{C}_i$。下标 p、i 和 m 分别表示与填料相、界面相和基体相对应的量。

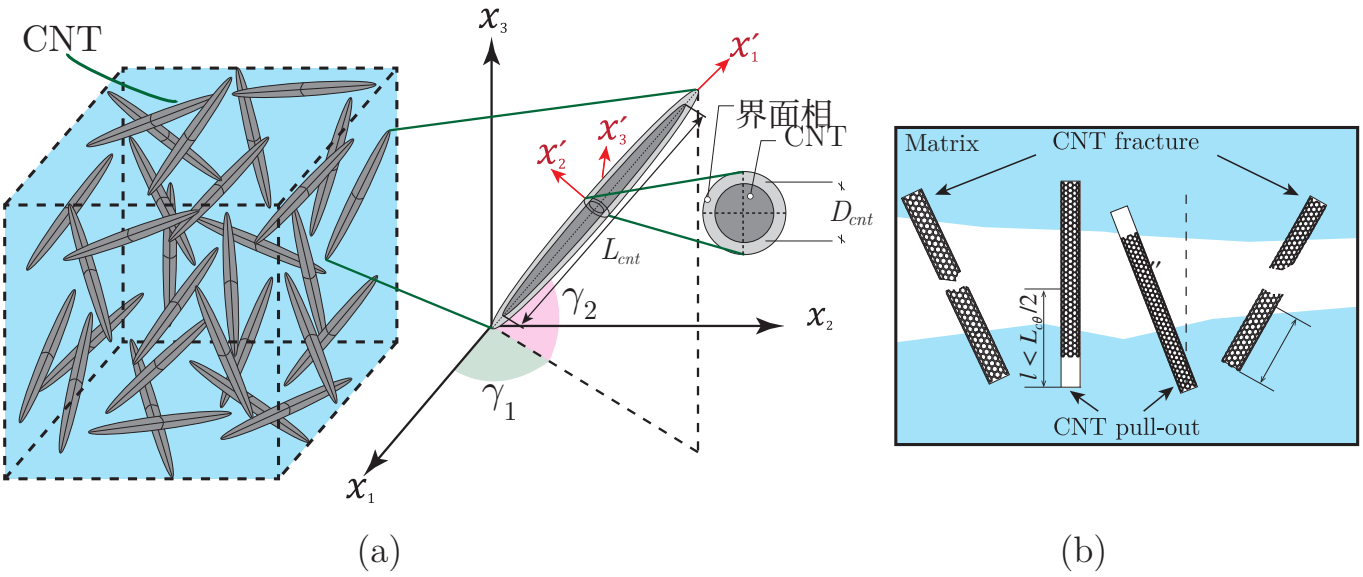


图 1：碳纳米管基复合材料：(a) 随机取向碳纳米管增强均质基体材料的 RVE 示意图；(b) 碳纳米管基复合材料相关的断裂与增韧机制。

按照 Hori 和 Nemat-Nasser 的记号约定，[18]，每根碳纳米管及其周围的界面相均定义为一个双重夹杂。关于这一点，该

复合材料 $\boldsymbol{C}$ 可写成 [16, 19]:

$$\boldsymbol{C} = \left(f_m \boldsymbol{C}_m + f_i \left\langle \boldsymbol{C}_i : \boldsymbol{A}_i \right\rangle + f_p \left\langle \boldsymbol{C}_p : \boldsymbol{A}_p \right\rangle\right) : \left(f_m \mathbf{I} + f_i \left\langle \boldsymbol{A}_i \right\rangle + f_p \left\langle \boldsymbol{A}_p \right\rangle\right)^{-1}, \tag{1}$$

其中， f_p、 f_i和 f_m 分别表示填料、界面相和基体的体积分数；冒号算子表示两个张量之间的张量内积，即（$\boldsymbol{A}:\boldsymbol{B}$）$_{ijmn} \equiv \boldsymbol{A}_{ijkl}\boldsymbol{B}_{klmn}$；张量 $\boldsymbol{A}_i$ 和$\mathbf{A}p$ 分别表示界面相和夹杂物的浓度张量。浓度张量可用相应的稀释浓度张量 $\boldsymbol{A}_i^{dil}$和 $\boldsymbol{A}_p^{dil}$表示为:

$$\boldsymbol{A}_\chi = \boldsymbol{A}_\chi^{dil} : \left(f_m \mathbf{I} + f_i \boldsymbol{A}_i^{dil} + f_p \boldsymbol{A}_p^{dil}\right)^{-1}, \quad \chi = p, i \tag{2}$$

$$\boldsymbol{A}_\chi^{dil} = \mathbf{I} + \boldsymbol{S} : \boldsymbol{T}_\chi, \quad \chi = p, i \tag{3}$$

其中,

$$\boldsymbol{T}_\chi = -\left(\boldsymbol{S} + \boldsymbol{M}_\chi\right)^{-1}, \quad \chi = p, i \tag{4}$$

$$\boldsymbol{M}_\chi = \left(\boldsymbol{C}_\chi - \boldsymbol{C}_m\right)^{-1} : \boldsymbol{C}_m, \quad \chi = p, i \tag{5}$$

方括号算子 $\langle\cdot\rangle$ 在式（1）中表示取向平均，对于任意场 $\boldsymbol{F}$，可定义为:

$$\left\langle \boldsymbol{F} \right\rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \boldsymbol{F}(\gamma_1, \gamma_2) \Omega(\gamma_1, \gamma_2) \sin(\gamma_2) \mathrm{d}\gamma_2 \mathrm{d}\gamma_1, \tag{6}$$

其中，Ω(γ_1， γ_2)表示填料的取向分布函数（ODF）。一般而言，碳纳米管分散到聚合物或水泥基体中时呈随机取向，ODF呈均匀分布，在整个欧拉空间内取常数值，即Ω(γ_1， γ_2) $= 1/2\pi$。

必须考虑碳纳米管与基体之间的界面效应，因为忽略这些效应的模型已被证明会高估复合材料的弹性性能 [55]。具体而言，界面被发现是薄弱区域，其载荷传递性能有限，并由范德华相互作用力决定。在碳纳米管基复合材料领域，可通过刚度较低的柔顺可穿透界面相模拟界面。Xu 等人推导了椭球形颗粒周围有限软界面相的体积分数公式 f_i [56] 如下:

$$f_i = (1-f_p)\left(1 - \exp\left\{-\frac{6f_p}{1-f_p}\left[\frac{\eta}{n(\kappa)} + \left(2 + \frac{3f_p}{n^2(\kappa)(1-f_p)}\right)\eta^2 + \frac{4}{3}\left(1 + \frac{3f_p}{n(\kappa)(1-f_p)}\right)\eta^3\right]\right\}\right), \tag{7}$$

其中， η 为界面厚度 t 与等效直径 D_{eq} 之比（即 $\eta = t/D_{eq}$）。等效直径表示与颗粒 [57] 体积相同的等效球体的直径；对于长宽比为 $\kappa = L_{cnt}/D_{cnt} > 1$ 的碳纳米管，可按 $D_{eq} = D_{cnt}\kappa^{1/3}$确定。项 n（κ）表示碳纳米管的球形度，即等效球体与颗粒的表面积之比，其表达式为：

$$n(\kappa) = \frac{2\kappa^{2/3}\tan\left(\arccos(1/\kappa)\right)}{\tan\left(\arccos(1/\kappa)\right) + \kappa^2\arccos(1/\kappa)}. \tag{8}$$

2.1.2. 断裂能：拔出与断裂

纳米管和纳米纤维会产生多种增韧机制，包括脱粘、拔出和断裂 [58]。特别是对于碳纳米管复合材料，拔出和断裂被认为是断裂抗力的主要贡献因素 [59]。这两种机制均示意于图 1b 中。因此，材料韧度或临界能量释放率 G_c 可表示为基体材料贡献与碳纳米管桥接机制贡献之和，即 [29]:

$$G_c = G_0 + G_{br} = G_0 + G_{Po} + G_{Fr} \tag{9}$$

其中， G_0 为基体断裂能， G_{br} 为包含两种主要增韧机制的项：碳纳米管的断裂和拔出，分别以 G_{Fr} 和 G_{Po}表示。碳纳米管拔出是由碳纳米管与基体之间的界面摩擦引起的，该摩擦作用沿纳米管较大的比表面积发展；相较于碳纳米管断裂机制，拔出机制的主导程度取决于纳米管特性和界面结合强度。当以某一角度 θ 取向的碳纳米管，其嵌入长度 l 等于或小于临界长度 $L_{c\theta}/2$时，将发生拔出机制；否则将发生碳纳米管断裂 [28]。临界长度 $L_{c\theta}$ 为：

$$L_{c\theta} = \frac{\sigma_{ult\theta} D_{cnt}}{2\tau_{int}\exp\left(\mu\theta\right)}, \tag{10}$$

其中， τ_{int} 为界面剪切应力，可通过原子力显微镜测得； [60], μ 为错向碳纳米管的弯折摩擦系数； [61], 且 $\sigma_{ult\theta}$ 为倾斜碳纳米管的断裂应力，其计算公式为：

$$\sigma_{ult\theta} = \sigma_{ult}(1 - A\tan\theta), \tag{11}$$

其中， σ_{ult} 为极限抗拉强度， A 为确定倾斜纤维强度的常数。因此，碳纳米管拔出和断裂所做的功可表示为关于嵌入长度的分段函数

l：

$$W(l,\theta)=\begin{cases} l^2\tau_{int}\pi D_{cnt}\exp(\mu\theta)/2 & \text{if } l<L_{c\theta}/2 \\ \pi D_{cnt}^2\sigma_{ult}^2 L_{cnt}/\left(8E_{cnt}\right) & \text{if } l\geq L_{c\theta}/2 \end{cases}, \tag{12}$$

其中， E_{cnt} 为碳纳米管的杨氏模量。最后，考虑直碳纳米管时的断裂能可表示为 [62]:

$$G_{br}=\frac{2f_p}{A_{cnt}L_{cnt}}\int_{\theta=0}^{\pi/2}\int_{l=0}^{L_{cnt}/2}W(l,\theta)g(\theta)\cos(\theta)\,\mathrm{d}l\mathrm{d}\theta, \tag{13}$$

其中， $g(\theta)$表示取向分布。尽管碳纳米管的取向具有显著的三维特性，但多项研究表明，只需一个角度 θ 即可描述加载方向与纤维轴 [28, 63], 之间的取向关系，如图1b所示。随后， $g(\theta)$定义为 [64]:

$$g(\theta)=\frac{[\sin(\theta)]^{2p-1}[\cos(\theta)]^{2q-1}}{\int_{\theta_{min}}^{\theta_{max}}([\sin(\theta)]^{2p-1}[\cos(\theta)]^{2q-1})\mathrm{d}\theta}, \tag{14}$$

其中， $\theta_{min}\leq\theta\leq\theta_{max}$ 和 $p\geq 1/2$、 $q\geq 1/2$是决定该分布形状的参数。

2.2. 碳纳米管基复合材料的电学性质

2.2.1. 电导率

碳纳米管基复合材料电导率的建模采用与前文第 2.1 节所述类似的微观力学方法。注意， $f_p(\varepsilon)$ 和 $f_c(\varepsilon)$ 都是机械应变的函数，其依赖关系将在后文解释。渗流理论表明，电导率机制以非线性方式取决于填料体积分数。具体而言，若碳纳米管填料含量 $f_p(\varepsilon)$ 低于渗流阈值 $f_c(\varepsilon)$，则纤维彼此距离过远，电子只能通过量子隧穿效应经由基体传输。然而，当填料含量高于渗流阈值时，碳纳米管趋于彼此接触并形成导电网络，如图 2a 所示。渗流碳纳米管的比例可 $\xi(\varepsilon)$近似表示为 [65]:

$$\xi(\varepsilon)=\begin{cases} 0 & 0\leq f_p(\varepsilon)<f_c(\varepsilon) \\ \frac{f_p(\varepsilon)^{1/3}-f_c^{1/3}(\varepsilon)}{1-f_c^{1/3}(\varepsilon)} & f_c(\varepsilon)\leq f_p(\varepsilon)\leq 1 \end{cases} \tag{15}$$

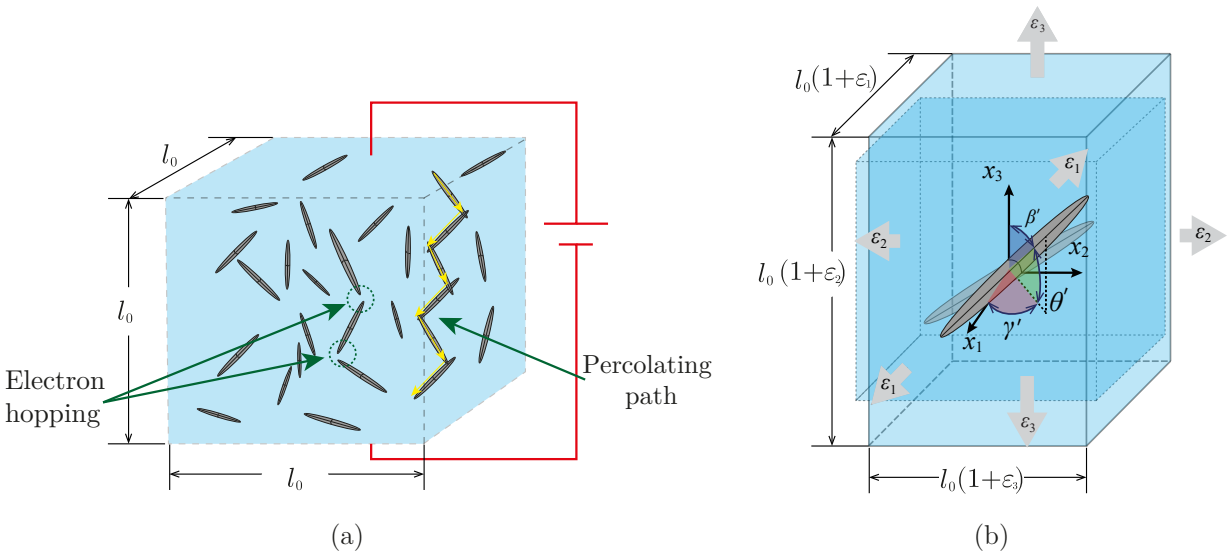


图2：示意图说明：(a) 控制碳纳米管基复合材料整体电导率的电子跳跃和导电网络机制，以及 (b) 立方体可变形单元中的应变诱导填料重取向效应。

因此，碳纳米管基复合材料电导率的建模应考虑通过电子跳跃（非渗流）和形成导电网络（渗流机制）发挥作用的填料。利用平均场均匀化可将其形式化表示为 [25, 26, 66],

$$\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\sigma}_m + \boldsymbol{\sigma}_{NP}(\boldsymbol{\varepsilon}) + \boldsymbol{\sigma}_P(\boldsymbol{\varepsilon}), \tag{16}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_P(\boldsymbol{\varepsilon}) = \xi(\boldsymbol{\varepsilon}) \left\langle f_p(\boldsymbol{\varepsilon})(\boldsymbol{\sigma}^P_{CNT}(\boldsymbol{\varepsilon}) - \boldsymbol{\sigma}_m)\mathbf{A}_P \right\rangle, \tag{17}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{NP}(\boldsymbol{\varepsilon}) = (1 - \xi(\boldsymbol{\varepsilon})) \left\langle f_p(\boldsymbol{\varepsilon})(\boldsymbol{\sigma}^{NP}_{CNT}(\boldsymbol{\varepsilon}) - \boldsymbol{\sigma}_m)\mathbf{A}_{NP} \right\rangle, \tag{18}$$

其中，项 $\boldsymbol{\sigma}_m$、 $\boldsymbol{\sigma}_{NP}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_P$ 分别对应基体的电导率张量、非渗流（NP）贡献和渗流（P）贡献。张量$\boldsymbol{\sigma}_{NP}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_P$ 采用等效实心圆柱体的横向各向同性电导率张量计算，其中考虑了碳纳米管的电导率以及可能发生电子跳跃的周围基体材料体积（更多详情请参阅附录A）。 $\boldsymbol{\sigma}_{NP}$ 中的量是在假设长椭球体长宽比为$a_2 = a_3 = D_{cnt}/2$ 且 $a_1 = L$的条件下计算的，而项 $\boldsymbol{\sigma}_P$ 则考虑了 $a_2 = a_3 = r_c$ 和 $a_1 \to \infty$。浓度张量$\mathbf{A}j$（其中， j 为 NP 或 P）估算如下:

$$\mathbf{A}_j = \mathbf{A}^{dil}\left((1 - f_p(\boldsymbol{\varepsilon}))\mathbf{I} + f\mathbf{A}^{dil}\right)^{-1}, \quad \mathbf{A}^{dil} = (\mathbf{I} + \mathbf{S}\boldsymbol{\sigma}_m^{-1}(\boldsymbol{\sigma}_f - \boldsymbol{\sigma}_m))^{-1}, \tag{19}$$

其中，$\mathbf{I}$ 为 3×3 单位矩阵，$\mathbf{S}=\mathrm{diag}(S_{11},S_{11},S_{33})$为形状相关的 Eshelby 张量。$\mathbf{S}$ 的分量由 [67, 68]给出：

$$S_{11}=\frac{s}{2(s^2-1)^{3/2}}\left[s(s^2-1)^{1/2}-\cosh^{-1}(s)\right],\quad S_{33}=1-2S_{11}, \tag{20}$$

其中 s 为填料长径比。

式 (16) 的一个重要特点是电导率依赖于应变张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$，这使复合材料 [66]产生压阻效应。文献中一致认为，驱动这种效应的主要机制有三种，即：(i) 体积膨胀，(ii) 填料重新取向，以及 (iii) 渗流阈值变化。第一种机制认为，应变会改变填料的体积分数 $f_p(\boldsymbol{\varepsilon})$，进而改变渗流填料的比例 ξ。根据 Garc´ía-Mac´ías 等人 [69], 提出的公式， f_p、未受应变时的纤维体积分数 $f_p(0)$ 与一般应变状态 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 之间的依赖关系为：

$$f_p(\boldsymbol{\varepsilon})=\frac{f_p(0)}{\bar{\varepsilon}_1\bar{\varepsilon}_2\bar{\varepsilon}_3}=\frac{f_p(0)}{\mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})+\det(\boldsymbol{\varepsilon})\mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^{-1})+\det(\boldsymbol{\varepsilon})+1}. \tag{21}$$

其中 $\bar{\varepsilon}_1=\varepsilon_1+1$、 $\bar{\varepsilon}_2=\varepsilon_2+1$ 和 $\bar{\varepsilon}_3=\varepsilon_3+1$。这里， ε_1、 ε_2、 ε_3 为三个主应变，$\det(\cdot)$ 和 $\mathrm{tr}(\cdot)$ 分别表示行列式和迹算子。机械应变引起的填料重新取向示意于图 3b。请注意，机械应变往往会降低填料方向分布的随机性。在假设不可伸长纤维发生刚性旋转的条件下，Garc´ía-Mac´ías 及其合作者 [69] 描述了任意应变状态 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 与用于式 (16) 中取向平均的取向分布函数之间的关系，如下：

$$w(\bar{\varepsilon}_1,\bar{\varepsilon}_2,\bar{\varepsilon}_3|\gamma_1,\gamma_2)=\frac{\bar{\varepsilon}_1^2\bar{\varepsilon}_2^2\bar{\varepsilon}_3^2}{\left[\bar{\varepsilon}_1^2\bar{\varepsilon}_2^2\cos^2(\gamma_2)+\bar{\varepsilon}_3^2\left(\bar{\varepsilon}_1^2\sin^2(\gamma_1)+\bar{\varepsilon}_2^2\cos^2(\gamma_1)\right)\sin^2(\gamma_2)\right]^{3/2}} \tag{22}$$

最后，填料方向的重新调整会导致渗流阈值发生变化，可根据 Komori 和 Makishima 提出的渗流理论 [70] 表述为：

$$f_c=\frac{\pi}{5.77sI}, \tag{23}$$

with

$$I=\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}J(\gamma_1,\gamma_2)\hat{w}(\gamma_1,\gamma_2)\sin(\gamma_2)\mathrm{d}\gamma_1\mathrm{d}\gamma_2, \tag{24}$$

$$J(\gamma_1,\gamma_2)=\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\sin\tau(\gamma_1,\gamma_1',\gamma_2,\gamma_2')\hat{w}(\gamma_1',\gamma_2')\sin(\gamma_2')\mathrm{d}\gamma_1'\mathrm{d}\gamma_2', \tag{25}$$

and

$$\sin\tau=\left[1-\left(\cos(\gamma_2)\cos(\gamma_2')+\cos(\gamma_1-\gamma_1')\sin(\gamma_2)\sin(\gamma_2')\right)^2\right]^{1/2}, \tag{26}$$

其中，$\hat{}w$ 是由式（22）得到的归一化取向分布函数。

2.2.2. 压阻系数

在小应变假设下，应变与电阻率之间可视为通过一个线性各向同性张量 $\mathbf{\Pi}$ 相关联，该张量称为压阻张量，即：

$$\begin{bmatrix}\Delta\rho_{11}/\rho_0\\ \Delta\rho_{22}/\rho_0\\ \Delta\rho_{33}/\rho_0\\ \Delta\rho_{23}/\rho_0\\ \Delta\rho_{13}/\rho_0\\ \Delta\rho_{12}/\rho_0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{12} & 0 & 0 & 0\\ \lambda_{12} & \lambda_{11} & \lambda_{12} & 0 & 0 & 0\\ \lambda_{12} & \lambda_{12} & \lambda_{11} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{\lambda_{11}-\lambda_{12}}{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\lambda_{11}-\lambda_{12}}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\lambda_{11}-\lambda_{12}}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\varepsilon_1\\ \varepsilon_2\\ \varepsilon_3\\ 2\varepsilon_{23}\\ 2\varepsilon_{13}\\ 2\varepsilon_{12}\end{bmatrix}. \tag{27}$$

因此，可将整体电阻率张量 $\boldsymbol{\rho}_{eff}$定义为电导率张量 $\boldsymbol{\sigma}_{eff}$（见式（16））的逆。在不存在机械载荷时，电阻率张量 $\boldsymbol{\rho}_{eff}$ 呈对角项为 ρ_0的标量矩阵形式，即 $\rho_{11}=\rho_{22}=\rho_{33}=\rho_0$ 和 $\rho_{23}=\rho_{13}=\rho_{12}=0$。复合材料发生机械应变后，电阻率矩阵的分量变化如下：

$$\boldsymbol{\rho}_{eff}=\rho_0\left(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{r}\right). \tag{28}$$

术语 $\boldsymbol{r}$ 表示电阻率相对变化张量，可与机械应变张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 建立如下关系： $\boldsymbol{r}=\mathbf{\Pi}\colon\ \boldsymbol{\varepsilon}$。由于压阻张量 $\mathbf{\Pi}$ 具有各向同性 [66], ，只需两个压阻系数（λ_{11} 和 λ_{12}）即可对其进行描述，剪切系数则由 $\lambda_{44}=(\lambda_{11}-\lambda_{12})/2$得出。本文采用 Buroni 和 Garc´ıa-Mac´ıas [66] 给出的有效电导率及压阻系数的闭式解。

3. 压阻材料断裂的相场电-力耦合模型

3.1. 控制方程

考虑一个固体域 Ω，其表面记为 $\partial\Omega$，法向量为 $\mathbf{n}$，如图 3a 所示。该域还包含一个不连续面 Γ，代表裂纹面。位移场和电势分别记为 $\mathbf{u}$ 和 φ。定义一个辅助相场变量 ϕ，其取值范围为 $\phi=0$ 至 $\phi=1$，分别对应材料的完整状态和完全断裂状态。相场对裂纹面进行正则化，其尺寸由长度尺度 ℓ [71,控制

72]。对于位移场，外表面可分为两部分：一部分施加位移 $\partial\Omega_u$，另一部分施加牵引边界条件 $\mathbf{h}$ $\partial\Omega_h$ （图 3a）。此外，可在固体内部指定任意裂纹面 Γ，并在 $\partial\Gamma_f$ 上施加断裂微牵引 f_ϕ （图 3b）。同时，可在边界 $\partial\Omega_{J_n}$上指定法向电流通量 J_n ，而在边界 $\partial\Omega_\varphi$ 上指定电势（图 3c）。在此框架下，忽略体力时，虚功原理可表述为：

$$\int_\Omega (\boldsymbol{\sigma}\colon \delta\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{J}\cdot\delta\nabla\varphi + \omega\cdot\delta\phi + \zeta\cdot\delta\nabla\phi)\,\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{h}\cdot\delta\mathbf{u} + J_n\delta\varphi + f_\phi\delta\phi)\,\mathrm{d}S, \tag{29}$$

其中，算子 δ 表示一阶变分， $\boldsymbol{\sigma}$ 为柯西应力张量，$\mathbf{J}$ 表示电流流动，而 ω 和 ζ 分别表示与相场ϕ 和相场梯度 $\nabla\phi$共轭的微应力功量。随后，对前述表达式应用高斯散度定理，并利用变分法基本引理，可得局部力平衡，其表达式为：

$$\begin{aligned} \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{0}, \\ \nabla\cdot\mathbf{J} &= 0 \quad \text{in} \quad \Omega, \\ \nabla\cdot\zeta - \omega &= 0, \end{aligned} \tag{30}$$

满足自然边界条件，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n} &= \mathbf{h} \quad \text{on} \quad \partial\Omega_h, \\ -\mathbf{J}\cdot\mathbf{n} &= J_n \quad \text{on} \quad \partial\Omega_{J_n}, \\ \zeta\cdot\mathbf{n} &= f_\phi \quad \text{on} \quad \partial\Omega_f. \end{aligned} \tag{31}$$

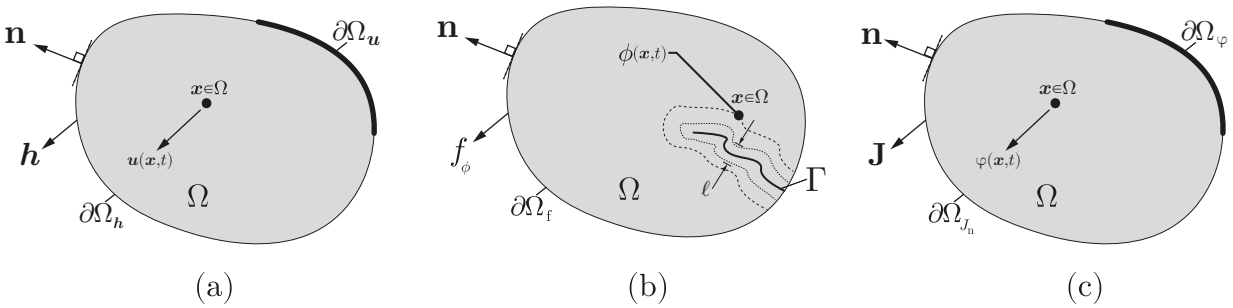


图 3：三场边值问题示意图：(a) 变形，(b) 相场，(c) 电流守恒。

3.2. 本构方程

变形-电-断裂耦合如下。首先，压阻效应使机械应变 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 对电场$\mathbf{E}$产生影响。此外，机械应变会导致储存能 ψ_0 （应变能密度）增加，从而为裂纹的萌生和扩展提供能量，使相场 ϕ的幅值增大。最后，裂纹的存在会影响电导率，这可通过采用特定的退化函数，使电流通量随相场退化来体现。下文将详细介绍这些及其他本构选项。

3.2.1. 机械变形

在小位移假设下，应变场表示为:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left(\nabla \mathbf{u}^{\mathrm{T}} + \nabla \mathbf{u}\right), \tag{32}$$

并且，假设应变与未损伤应力张量$\boldsymbol{\sigma}_0$之间存在线弹性关系，则固体的力学行为由下式给出

$$\boldsymbol{\sigma} = h_1(\phi)\boldsymbol{\sigma}_0 = h_1(\phi)\boldsymbol{C} \colon \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{33}$$

其中， $\boldsymbol{C}$ 为线弹性刚度张量， $h_1(\phi)$为将相场变量与材料刚度相关联的退化函数。

3.2.2. 电导率

电场$\mathbf{E}$ 与电势 φ 之间的关系为:

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi, \tag{34}$$

而本构方程由电导率 $\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon})$与电流$\mathbf{J}$之间的线性关系给出，其中电导率是式（28）中给出的电阻率 $\boldsymbol{\rho}_{eff}$ 的倒数（即 $\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\rho}_{eff}^{-1}$）：

$$\mathbf{J} = h_2(\phi)\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{E}. \tag{35}$$

此处， $h_2(\phi)$ 表示第二个退化函数，它会影响材料电导率，用以模拟裂纹内部发生的电渗透率变化。通过考虑电学问题的强形式，即式 (30)b，并

令其对任意可容许的 $\delta\varphi$ 均成立。因此，应用散度定理并考虑本构定义 (34) 和 (35)，可得

$$\int_{\Omega} (\delta\nabla\varphi)\, h_2(\phi)\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon})\nabla\varphi \,\mathrm{d}V = \int_{\partial\Omega_{J_n}} J_n \,\mathrm{d}S. \tag{36}$$

值得注意的是，退化函数 h_2 可以调节电导率的突变。因此，尽管相场损伤会导致刚度损失，进而产生较大的应变，但不会因此产生较大的电流。

3.2.3. 相场断裂

相场断裂模型将裂纹的演化描述为储存能与断裂能之间的交换，其建立在 Griffith[73, 74] 首次提出的严谨热力学平衡基础之上。对于应变能为 $\Psi(\boldsymbol{\varepsilon})$、承受给定位移的含裂纹固体，Griffith 能量平衡可表示为固体总势能 $\mathcal{E}$ 因裂纹面积增加 $\mathrm{d}A$而产生的如下变分：

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{E}}{\mathrm{d}A} = \frac{\mathrm{d}\Psi(\boldsymbol{\varepsilon})}{\mathrm{d}A} + \frac{\mathrm{d}W_c}{\mathrm{d}A} = 0, \tag{37}$$

其中，W_c 是形成新表面所需的功，固体（或材料）的断裂抗力（即材料韧度）表示为 $G_c = \mathrm{d}W_c/\mathrm{d}A$。方程（37）可表示为如下变分形式：

$$\mathcal{E} = \int_{\Omega} \psi\left(\boldsymbol{\varepsilon}\right) \mathrm{d}V + \int_{\Gamma} G_c \,\mathrm{d}\Gamma\,, \tag{38}$$

其中，ψ 是固体的应变能密度，因此有 $\Psi = \int \psi \mathrm{d}V$。随后，为了使方程（38）的最小化在计算上可行，引入相场范式，使用辅助变量 ϕ 将原本离散的界面弥散化，并跟踪该界面的演化。据此，可将正则化泛函表示为：

$$\mathcal{E}_\ell = \int_{\Omega} \left[h_1(\phi)\psi_0\left(\boldsymbol{\varepsilon}\right) + G_c \left(\frac{\phi^2}{2\ell} + \frac{\ell}{2}|\nabla\phi|^2 \right) \right] \mathrm{d}V\,. \tag{39}$$

其中，ψ_0 表示未损伤材料的应变能密度，对于弹性固体，其表达式为：

$$\psi_0 = \frac{1}{2}\,\boldsymbol{\varepsilon}^T : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}. \tag{40}$$

在本研究中，式（39）中乘以 G_c 的正则化项采用了所谓的 AT2 相场模型 [71]。还需注意，对于压阻材料，电场

不会影响相场方程（与压电材料不同 [52]）。随后，可依据热力学一致性准则 [75] 推导相场本构方程。因此，固体的总势能等于储能密度与断裂能密度之和：

$$\mathcal{W}(\boldsymbol{\varepsilon}, \phi, \nabla\phi) = h_1(\phi)\psi_0(\boldsymbol{\varepsilon}) + G_c\left(\frac{1}{2\ell}\phi^2 + \frac{\ell}{2}|\nabla\phi|^2\right). \tag{41}$$

标量微观应力 ω 和矢量微观应力 ζ 随后由总势能推导得到：

$$\omega = \frac{\partial\mathcal{W}}{\partial\phi} = \frac{\partial h_1}{\partial\phi}\psi_0 + G_c\frac{\phi}{\ell}, \qquad \text{and} \qquad \zeta = \frac{\partial\mathcal{W}}{\partial\nabla\phi} = G_c\,\ell\,\nabla\phi. \tag{42}$$

3.3. 退化函数

接下来需要定义公式（33）和（35）中分别引入的退化函数 $h_1(\phi)$和 $h_2(\phi)$。前者描述了因损伤导致材料退化所伴随的刚度损失。为此，我们采用广泛使用的二次函数

$$h_1(\phi) = (1-\phi)^2. \tag{43}$$

另一方面，必须定义退化函数 $h_2(\phi)$，以考虑裂纹导致的电渗透率变化。为捕捉材料断裂时观察到的局部电阻率显著增加现象，我们提出以下双参数指数函数：

$$h_2(\phi, k, n) = \frac{1-\exp\left(-k(1-\phi)^n\right)}{1-\exp\left(-k\right)}. \tag{44}$$

参数 k 和 n 控制退化函数 $h_2(\phi, k, n)$的形状，如图 4 所示。可以看出，形状参数 k 和 n 可用于模拟多种退化函数。例如，取 $n = 6$ 并增大 k，即可模拟更易渗透的裂纹（给定 ϕ时，h 数值更高）。参数 n 则控制退化函数的平滑程度：取较小值时（例如 k=50 和 n=4），电导率会急剧下降；取较大值时（例如 k=50 和 n=8），电导率则会平缓下降。我们将针对不同的 k 和 n 取值进行有限元预测，以说明它们的影响。如下文所述，选择 $k = 50$ 和 $n = 6$ 能够得到合理的结果，同时确保稳健性。因此，除非另有说明，本文均采用这组取值。

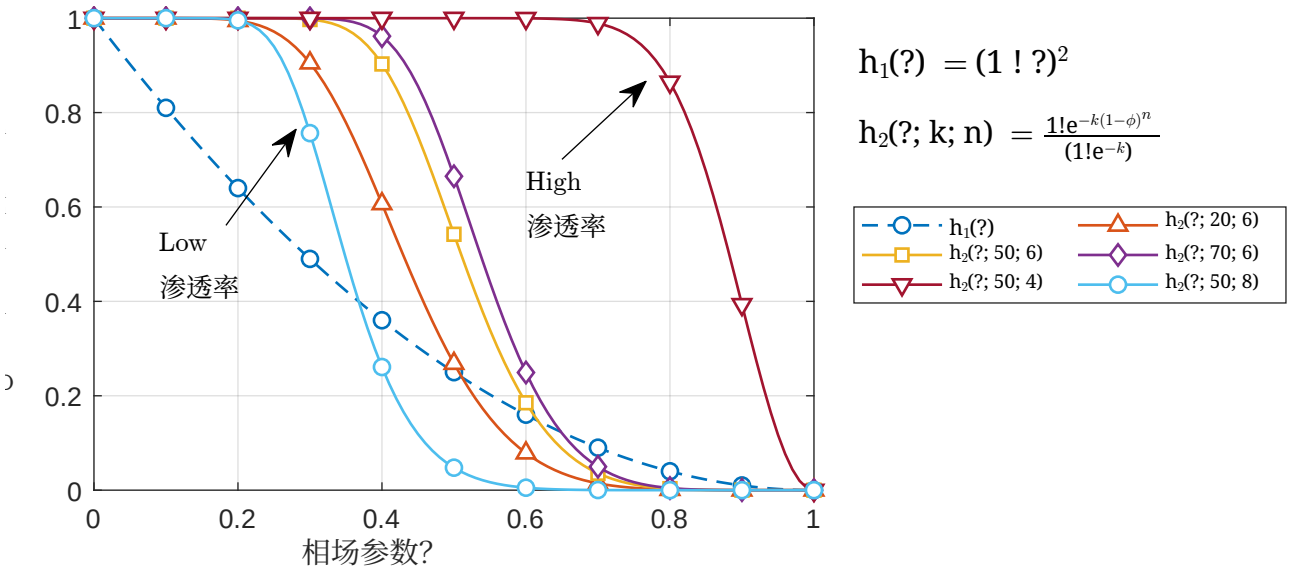


图4：用于插值相场 $h_1(\phi)$ 和电导率 $h_2(\phi,\ k,\ n)$ 的退化函数；后者取决于参数 k 和 n。

还需注意，出于数值计算方面的考虑，我们在 $h_1(\phi)$ 和 $h_2(\phi,k,n)$ 中均加入了一个较小的正则化参数 $\epsilon=10^{-7}$，以确保方程组具有良好的条件数。

3.4 有限元实现

采用有限元法对第3.1节给出的控制方程进行离散化并求解。场变量包括位移、电势和相场，其离散形式如下：

$$\mathbf{u}=\sum_{i=1}^{m}\mathbf{N}_i\mathbf{u}_i,\quad \varphi=\sum_{i=1}^{m}N_i\varphi_i,\quad \phi=\sum_{i=1}^{m}N_i\phi_i, \tag{45}$$

其中，m 表示单元内的节点数，N_i 为形函数，而$\mathbf{N}_i$表示对角矩阵，每个分量上均为节点形函数 N_i。应变$\boldsymbol{\varepsilon}$、电场 $\mathbf{E}=-\nabla\varphi$和相场梯度 $\nabla\phi$ 相应地插值如下：

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{B}_i^{\mathbf{u}}\mathbf{u}_i,\quad \mathbf{E}=-\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{B}_i\varphi,\quad \nabla\phi=\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{B}_i\phi_i, \tag{46}$$

其中，$\boldsymbol{B}_i$ 为空间导数和形函数，$\boldsymbol{B}_i^{\mathbf{u}}$表示标准应变-位移矩阵。利用式（30）中的动量平衡、相场和电流守恒表达式，可以将与各主场对应的弱形式表示为：

$$\int_{\Omega}h_1(\phi)\boldsymbol{\sigma}_0:\delta\boldsymbol{\varepsilon}\,\mathrm{d}V-\int_{\partial\Omega_h}\mathbf{h}\cdot\delta\mathbf{u}\,\mathrm{d}S=0, \tag{47}$$

$$\int_{\Omega}\left[h_2(\phi,k,n)\left(\delta\nabla\varphi\right)\cdot\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon})\nabla\varphi\right]\,\mathrm{d}V-\int_{\partial\Omega_{J_n}}\delta\varphi J_n\,\mathrm{d}S=0, \tag{48}$$

$$\int_{\Omega}\left[\frac{\partial h_1}{\partial\phi}\delta\phi\psi_0+G_c\left(\frac{1}{\ell}\phi\delta\phi+\ell\nabla\phi\cdot\delta\nabla\phi\right)\right]\,\mathrm{d}V-\int_{\partial\Omega_f}f_{\phi}\delta\phi\,\mathrm{d}S=0. \tag{49}$$

随后，残差的有限元离散可表示为:

$$\mathbf{R}_i^u=\int_{\Omega}h_1(\phi)(\boldsymbol{B}_i^u)^T\boldsymbol{\sigma}_0\,\mathrm{d}V-\int_{\partial\Omega_h}\mathbf{N}_i^T\mathbf{h}\,\mathrm{d}S, \tag{50}$$

$$\mathrm{R}_i^{\varphi}=\int_{\Omega}\left[h_2(\phi,k,n)\boldsymbol{B}_i^T\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon})\nabla\varphi\right]\,\mathrm{d}V-\int_{\partial J_n}N_i^TJ_n\,\mathrm{d}S, \tag{51}$$

$$\mathrm{R}_i^{\phi}=\int_{\Omega}\left[G_c\left(\frac{1}{\ell}N_i\phi+\ell\boldsymbol{B}_i^T\nabla\phi\right)+\frac{\partial h_1}{\partial\phi}N_i\mathcal{H}\right]\,\mathrm{d}V-\int_{\partial\Omega_f}N_if_{\phi}\,\mathrm{d}S, \tag{52}$$

其中，我们采用所谓的历史变量 $\mathcal{H}$ [76]以确保损伤不可逆性，即对于总时间 t_t内的时间 t，满足$\mathcal{H}=\max_{t\in[0,t_t]}\psi(t)$。最后，相应的刚度矩阵可表示为:

$$\boldsymbol{K}_{ij}^u=\frac{\partial\mathbf{R}_i^u}{\partial\mathbf{u}_j}=\int_{\Omega}h_1(\phi)(\boldsymbol{B}_i^u)^T\boldsymbol{C}\boldsymbol{B}_j^u\mathrm{d}V, \tag{53}$$

$$\boldsymbol{K}_{ij}^{\varphi}=\frac{\partial\mathbf{R}_i^u}{\partial\varphi_j}=\int_{\Omega}h_2(\phi,k,n)(\boldsymbol{B}_i)^T\boldsymbol{\sigma}_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{B}_j\mathrm{d}V, \tag{54}$$

$$\boldsymbol{K}_{ij}^{\phi}=\frac{\partial\mathbf{R}_i^{\phi}}{\partial\phi_j}=\int_{\Omega}\left[\left(2\mathcal{H}+\frac{G_c}{\ell}\right)N_iN_j+G_c\ell\boldsymbol{B}_i^T\boldsymbol{B}_j\right]\mathrm{d}V. \tag{55}$$

因此，变形-电学-损伤有限元系统可表示为 s

$$\begin{Bmatrix}\mathbf{u}\\ \varphi\\ \phi\end{Bmatrix}_{t+\Delta t}=\begin{Bmatrix}\mathbf{u}\\ \varphi\\ \phi\end{Bmatrix}_t-\begin{bmatrix}\boldsymbol{K}^u & 0 & 0\\ 0 & \boldsymbol{K}^{\varphi} & 0\\ 0 & 0 & \boldsymbol{K}^{\phi}\end{bmatrix}_t^{-1}\begin{Bmatrix}\mathbf{R}^{\mathbf{u}}\\ \mathbf{R}^{\varphi}\\ \mathbf{R}^{\phi}\end{Bmatrix}_t. \tag{56}$$

式 (56) 中给出的系统是完全耦合的。机械变形分别通过应变能密度和压阻特性影响相场变量和电势。此外，相场通过第 3.2.3 节所述的退化函数降低固体的刚度和电导率。采用整体式方案处理这些耦合，从而确保无条件稳定性。通过拟牛顿方法近似式 (56) 中的刚度矩阵，可提高整体式求解方案的鲁棒性和效率。具体而言，采用 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno（BFGS）算法，因为该算法已被证明能够实现高效且稳健的整体式相场断裂求解 [77, 78]。变形-电学-断裂模型

通过用户单元（UEL）子程序的形式在有限元软件包 Abaqus 中实现，并已公开共享[1]。为保证通用性，有限元实现采用线性砖单元，包含 8 个节点、全积分，且每个节点有 5 个自由度（DOFs）（u_x, u_y, u_z, φ,ϕ）。不过，在下文讨论的部分案例研究中，该实现也针对二维场景作了专门调整。

4. 结果

本节评估该模型在模拟裂纹萌生与扩展，以及这些过程对掺有多壁碳纳米管（MWCNTs）的环氧树脂复合材料机电响应的影响方面的性能。所研究复合材料各组分的机电性能取自文献，并汇总于表1。首先在第4.1节报告参数分析，以评估填料体积分数和碳纳米管长径比的影响。随后介绍五个案例研究。第一个案例研究将所提出的公式与 Esmaeili 等人 [79]报告的实验数据进行对比验证（第4.2节）。接着，通过三个涉及不同初始缺陷构型的平面边值问题案例研究，进一步深入分析（第4.3至4.5节）。最后，第4.6节研究三维裂纹成核与扩展。

表1：所采用的材料参数和微观力学变量。所选数值对应多壁碳纳米管/环氧树脂复合材料，取自文献 [29, 80]。

Name	符号	数值	Name	符号	数值
体积分数	f_p	1%	多壁碳纳米管长度	L_{cnt}	3.21 μ米
多壁碳纳米管外径	D_{cnt}	10.35 纳米	隧穿效应截止距离	d_c	0.22 纳米
势垒高度	λ	0.69 eV	碳纳米管弹性模量	E_{cnt}	700 GPa
环氧树脂弹性模量	E_m	2.5 GPa	多壁碳纳米管电导率	σ_c	100 S/m
环氧树脂电导率	σ_m	1.036E-10 S/m	MWCNT 的泊松比	ν_{cnt}	0.3
环氧树脂泊松比	ν_m	0.28	界面相厚度	t	31.00 nm
界面相弹性模量	E_i	2.17 GPa	碳纳米管强度	σ_{cnt}	35 GPa
界面剪切强度	τ_{cnt}	47 MPa	未改性环氧树脂的断裂能	G_{ce}	133 J/m^2
实验取向极限角	A	0.083	碳纳米管最小取向角	θ_{min}	0
碳纳米管最大取向角	θ_{max}	$\pi/2$			

[1]开发的 UEL子程序可在 www.imperial.ac.uk/mechanics-materials/codes 和 www.github.com/L-Quinteros 上找到

4.1. 本构性质的估算

采用第2节中提出的公式，估算宽范围填料体积分数和长径比 AR $=L_{cnt}/D_{cnt}$下环氧树脂/多壁碳纳米管复合材料的弹性模量、临界能量释放率、电导率和线性压阻常数 λ_{11} ，结果如图5所示。结果表明，有效弹性模量和断裂能呈线性变化，而电导率和压阻系数 λ_{11} 则呈现非线性变化。弹性模量和断裂能随体积分数增加而增大，而随着长径比（ARs）增加，则呈现相反趋势。值得注意的是，图5a显示，弹性模量随 ARs 增加而快速收敛（ARs 超过300后未见显著提升），而断裂能的收敛速度较慢 G_c。根据式（12），断裂能主要由拔出机制控制，该机制取决于临界嵌入长度；而临界嵌入长度又与直径有关，因此在长径比较低时，断裂能会增大。电导率和压阻系数 λ_{11}则呈现截然不同的趋势。首先，在低体积分数下，它们几乎不敏感，此时电子跳跃机制占主导。然而，当碳纳米管体积分数达到渗流阈值时，数值显著上升，这标志着网络形成机制开始发挥作用。还值得注意的是，图5d插图显示了渗流阈值 f_c 随填料长径比的变化。该结果表明，长径比较大的填料更有利于形成导电网络，进而降低渗流阈值。

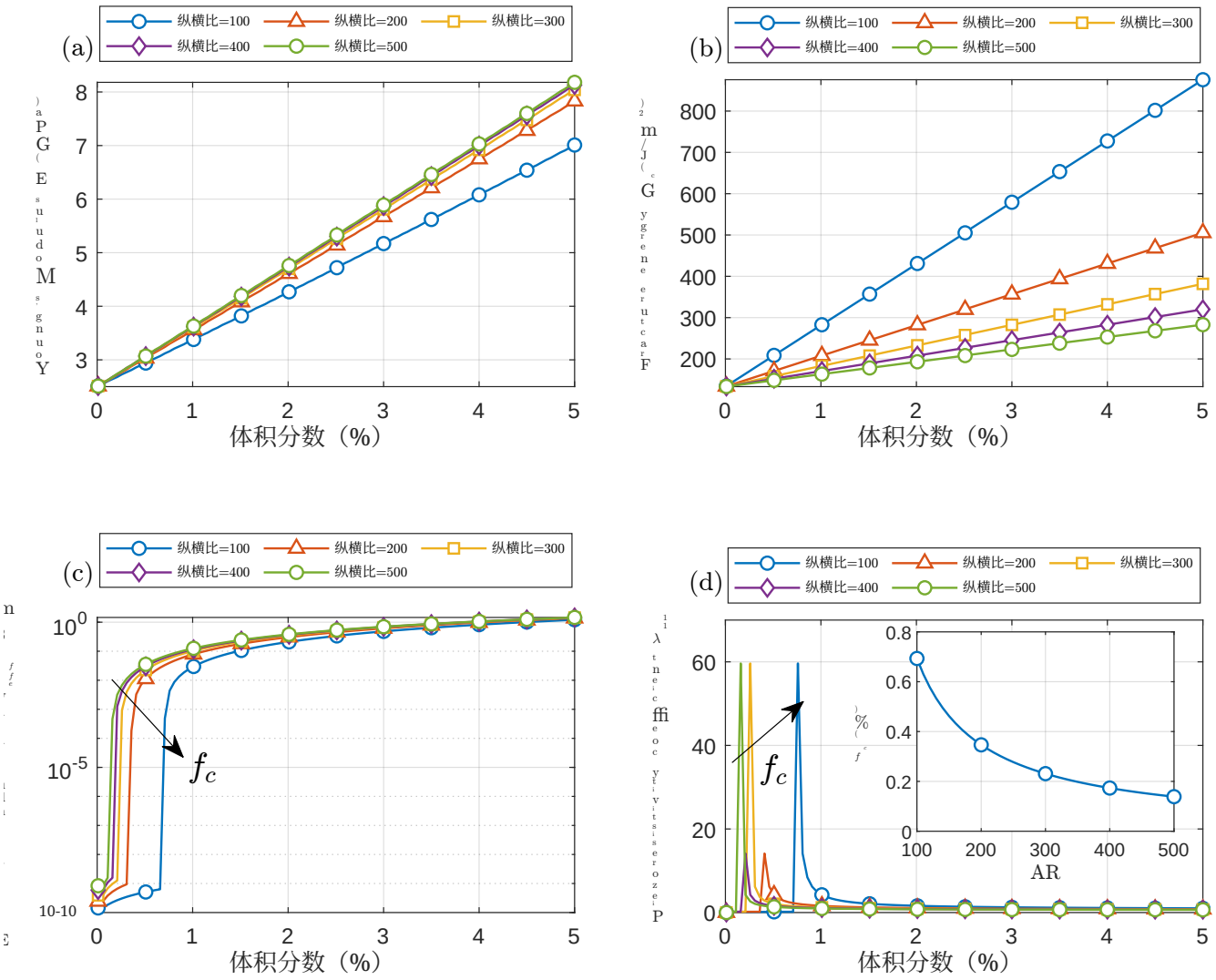


图5：利用所提出的微观力学框架估算的环氧树脂/多壁碳纳米管复合材料的机电性能，包括：(a) 弹性模量、(b) 断裂能、(c) 电导率和 (d) 压阻系数 λ_{11}；插图表示渗流阈值 f_c 随填料长径比（纵横比）变化的情况。

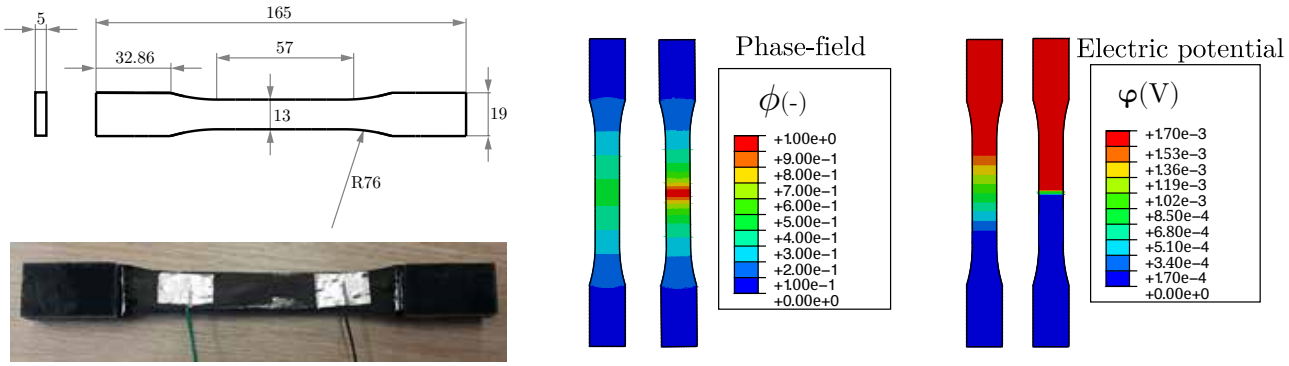
4.2. 实验验证

以下案例研究使用 Esmaeili等人 [79]工作中报告的实验数据，对所提出的模型进行验证。这些作者报告了由掺有单壁和双壁碳纳米管（单壁碳纳米管-双壁碳纳米管）的双酚A二缩水甘油醚（DGBEA）环氧树脂制成的哑铃形试样在拉伸至失效过程中的机电特性。试样尺寸如图6a所示。在数值模型中，试样采用总计197,120个自由度进行离散化，相关区域的特征单元长度比相场长度尺度小7倍（$\ell = 0.0012$ mm）。该结构受到其顶边竖向位移的作用，而底边固定。

电极彼此相距5 cm，并在一个13×5 mm^2 面积内施加1.7 mV的电势差。碳纳米管的质量分数为0.5 wt%，表2中的其余微观力学参数通过与实验结果进行曲线拟合获得，拟合时采用了文献中报道的DGBA环氧树脂和碳纳米管的典型数值。实验中报告的电极间电阻约为8500 Ω，而数值模型预测的电阻为8485 Ω，表明该模型对于复合材料未受应变状态的预测有效。相场和电势等值线图分别见图6b和图6c。应力-应变曲线和相对电阻-应变曲线分别见图7a和图7b。两条曲线均与实验数据吻合良好。值得注意的是，与呈现明显线性趋势的实验结果不同，数值应力-应变曲线在高拉伸应变下略有下降。这些差异归因于所假设的刚度二次退化函数以及所谓的 `AT2` 模型的使用，该模型不包含纯弹性域。图7b中的结果表明，与数值模拟相比，实验数据呈现出稍明显的非线性行为。文献指出，应变传感曲线中的非线性是由应变诱发的电子跳跃机制贡献变化所导致的。在第2.2节所采用的微观力学方法框架下，这可能表明，与量子隧穿效应相关的电阻率特性应变依赖性的理论定义存在一定局限性（相关讨论请参见例如 [26] ）。尽管如此，所采用的微观力学方法的准确性对于本文的研究目的而言已足够，特别是对于应变传感应用的分析，因为压阻式碳纳米管基复合材料中的非线性效应非常有限。

表2：用于通过DGBA/DWCNT复合材料试验进行实验验证的微观力学变量。所用数值处于文献报道的DGBA/DWCNT复合材料数值范围内 [29, 79,80]。

Name	符号	数值	Name	符号	数值
质量分数	w_p	0.5 %	碳纳米管长度	L_{cnt}	5.39 μm
碳纳米管外径	D_{cnt}	1.203 nm	隧穿效应截止距离	d_c	2.739 nm
势垒高度	λ	1.93 eV	碳纳米管弹性模量	E_{cnt}	950 GPa
环氧树脂弹性模量	E_m	2.79 GPa	碳纳米管电导率	σ_c	764.91 S/m
环氧树脂电导率	σ_m	1.00E-12 S/m	碳纳米管泊松比	ν_{cnt}	0.3
环氧树脂泊松比	ν_m	0.285	界面相厚度	t	31.00 nm
界面相弹性模量	E_i	2.24 GPa	碳纳米管密度	ρ_{cnt}	1.35 g/cm^3
界面剪切强度	τ_{cnt}	47 MPa	未改性环氧树脂的断裂能	G_{ce}	220 J/m^2
实验取向极限角	A	0.083	碳纳米管最小取向角	θ_{min}	0
碳纳米管最大取向角	θ_{max}	$\pi/2$	环氧树脂密度	ρ_m	1.15 g/cm^3
碳纳米管强度	σ_{cnt}	120 GPa			



(a) (b) (c)

图6：实验验证：(a) 试样尺寸（单位：mm）和构型；开裂前（$\varepsilon_1 = 0.0123$）和开裂后（$\varepsilon_1 = 0.0124$）的 (b) 相场变量和 (c) 电势云图。

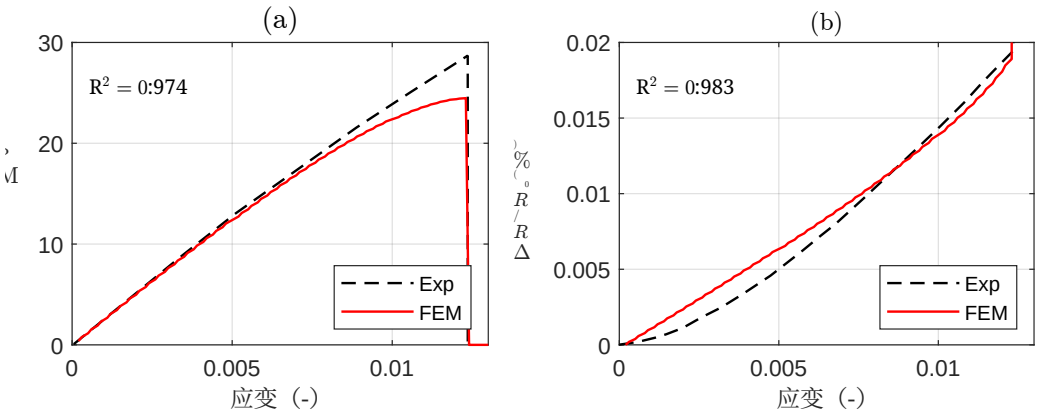


图7：DGBA/DWCNT复合材料实验 [79]与数值预测结果的比较： (a) 应力-应变曲线；(b) 电阻相对变化与外加应变的关系。

4.3. 含初始裂纹薄板的混合模态断裂

第二个案例研究涉及一块长10 cm、宽20 cm、厚0.5 cm的带缺口板，其顶部边缘施加竖向位移，底部边缘则固定。缺口通过几何方式设置，电势则通过两个电极施加，如图8a所示。上部电极接地，底部边缘施加10 V的差分电势。在以下分析中，考虑体积分数为 $f_p = 1\%$以及退化参数 $k = 50$ 和 $n = 6$ 。本案例及其余所有案例研究所采用的材料属性均见表1。值得注意的是，假设的碳纳米管长径比 $L_{cnt}/D_{cnt} = 310$处于纤维拔出占主导、而非纤维断裂机制占主导的范围内，这与参考文献 [50]中开展的敏感性分析结果一致。

该区域采用约 100,000 个自由度进行离散，潜在裂纹扩展区域的特征单元尺寸为 0.002 mm，比相场长度尺度 ℓ小三倍。图9展示了相场变量和电势的等值线图。图9a展示了施加位移 $u_y = 0.1975$ mm 、 $u_y = 0.1875$ mm 和 $u_y = 0.19$ mm 时，三个不同时刻相场变量 ϕ 的演变。裂纹尖端周围的相场值逐渐增大，随后裂纹沿水平方向扩展。在完全失效之前，相场对电势的影响微乎其微，只能观察到压阻效应引起的线性变化。然而，板发生开裂后，流经电极的电流会骤然下降。图9(b)中的电势等值线图清楚地显示了这一现象：裂纹贯穿整个

试样后，由于裂纹区域的电渗透率极低（或电阻率极高），可观察到两个电势分别为 0 V 和 10 V 的不同区域。

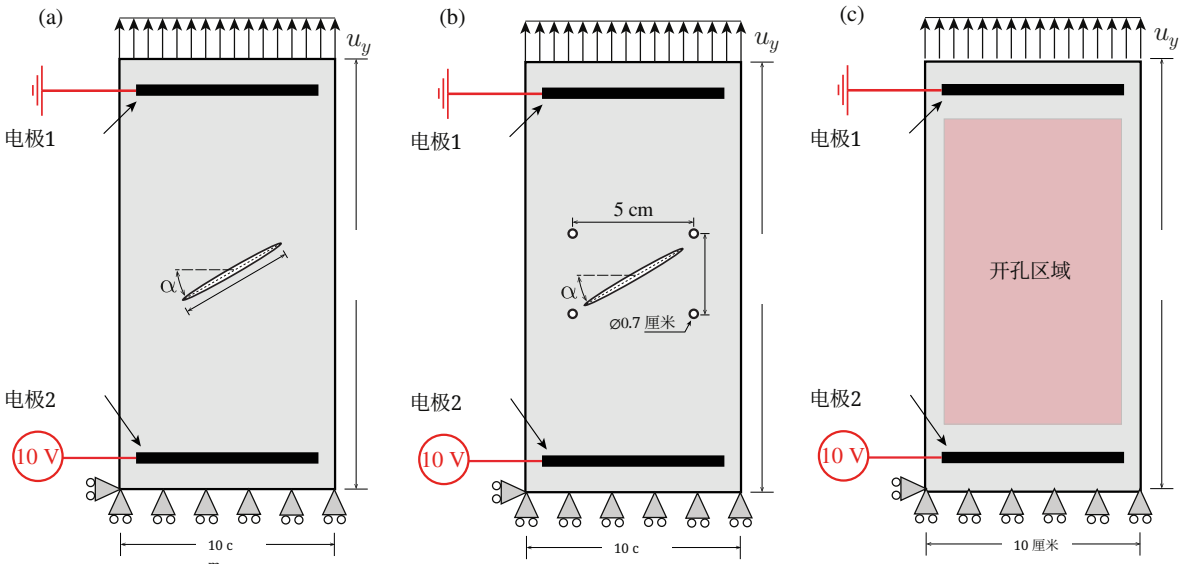


图8：三个平面案例的板几何形状及边界条件示意图，包括：(a) 含有一条倾斜裂纹的板，(b) 含有一条倾斜裂纹和多个孔洞的板，以及 (c) 含有随机分布孔洞的板。所有案例均采用相同的电学和位移边界条件。

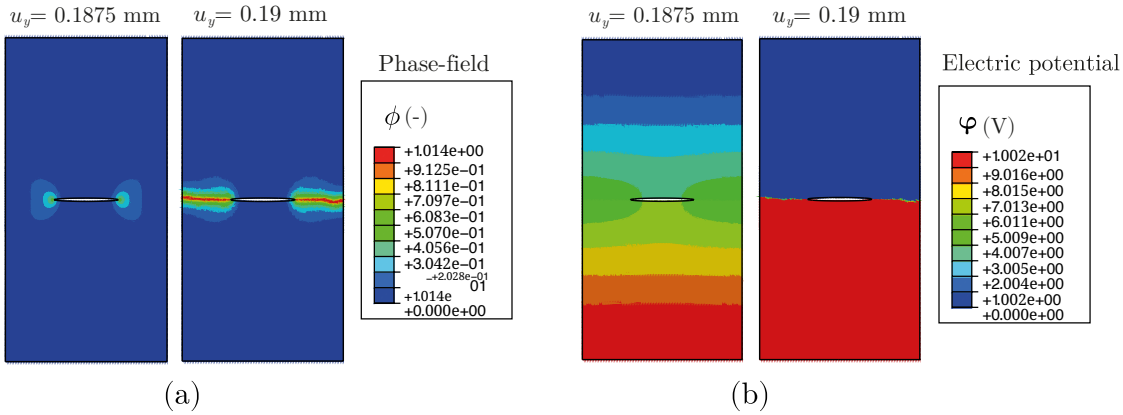


图9：含有初始裂纹的板的混合型断裂。两个远场位移数值（完全断裂前后）下的 (a) 相场变量 ϕ 和 (b) 电势 φ 等值线。

图10a研究了退化函数 $h_2(\phi,\ k,\ n)$ 的形状参数 k 和 n 对流经电极的电流的影响。请注意，所有曲线均对应于图10c所示的同一载荷-位移曲线。对于所有情况，图10a所示的结果表明，在板发生裂纹之前，曲线略有下降，随后电导率急剧下降。可以观察到，电导率曲线的斜率

会随 k 和 n而显著变化。实际应用中，可以通过拟合实验数据来校准退化函数 $h_2(\phi,\ k,\ n)$。图10b展示了电阻的相对变化，该变化使用无应变电阻 R_0 和瞬时电阻 R 计算得出，即 $(R-R_0)/R_0$。在这种情况下，结果表明，一旦位移达到断裂位移，电阻便会急剧增大。

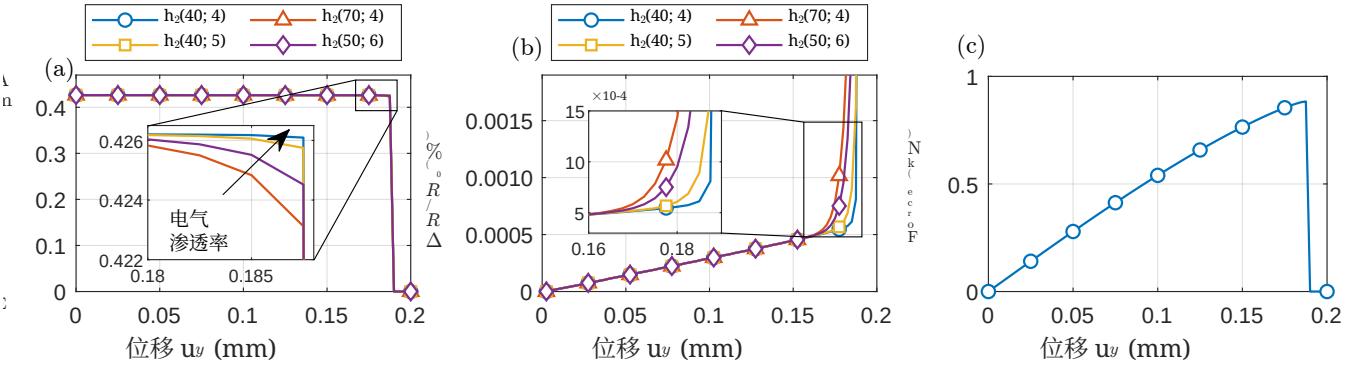


图10：退化函数 $h_2(\phi,\ k,\ n)$ 对以下内容的影响：(a) 电流，(b) 相对电阻 $\Delta R/R_0$，以及 (c) 相应的载荷-位移曲线。

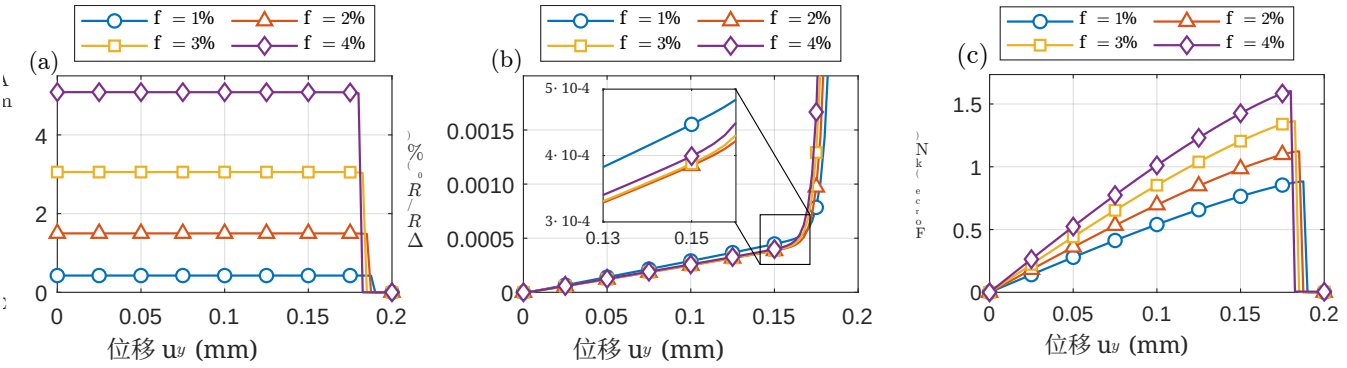


图11：填料体积分数 f_p 对以下内容的影响：(a) 电流-位移曲线，(b) 相对电阻 $\Delta R/R_0$，以及 (c) 载荷-位移曲线。

图11展示了碳纳米管体积分数对电极间电流、电阻相对变化以及载荷-位移曲线的影响。由图11a可见，考虑较高的碳纳米管体积分数会提高电流，这是因为复合材料的有效电导率增强了。在该图中，可以清楚地看到两个不同的行为阶段：裂纹萌生前和裂纹萌生后。第一阶段主要表现为由复合材料的压阻特性引起的线性下降。相反，一旦裂纹萌生，电流通过

试样的导电便主要由裂纹的渗透率决定。例如，在位移加载过程开始时，掺入 $f_p = 4\%$ 碳纳米管的环氧树脂中的电流为 5.8782 mA，而在断裂前降至 5.8604 mA。最后，当裂纹贯穿试样的整个横截面时，电流降为零，表明电流完全中断。图11b显示了不同填料体积分数下，相对电阻随施加位移 u_y的变化。由图可见，增加体积分数会提高压阻系数，这从第一个线性区间更大的斜率可以看出。提高碳纳米管浓度也会增强复合材料的有效力学性能，这体现在图11c载荷-位移曲线的斜率增大。需要注意的是，添加碳纳米管会减小板断裂时的位移u_y，这可以很容易地从能量角度解释。随着添加碳纳米管所带来的弹性模量提升，载荷-位移曲线下的面积增大，因此断裂位移减小。注意，在图5b中，相对于弹性模量，填料含量增加时临界能量释放率的增幅要小得多。

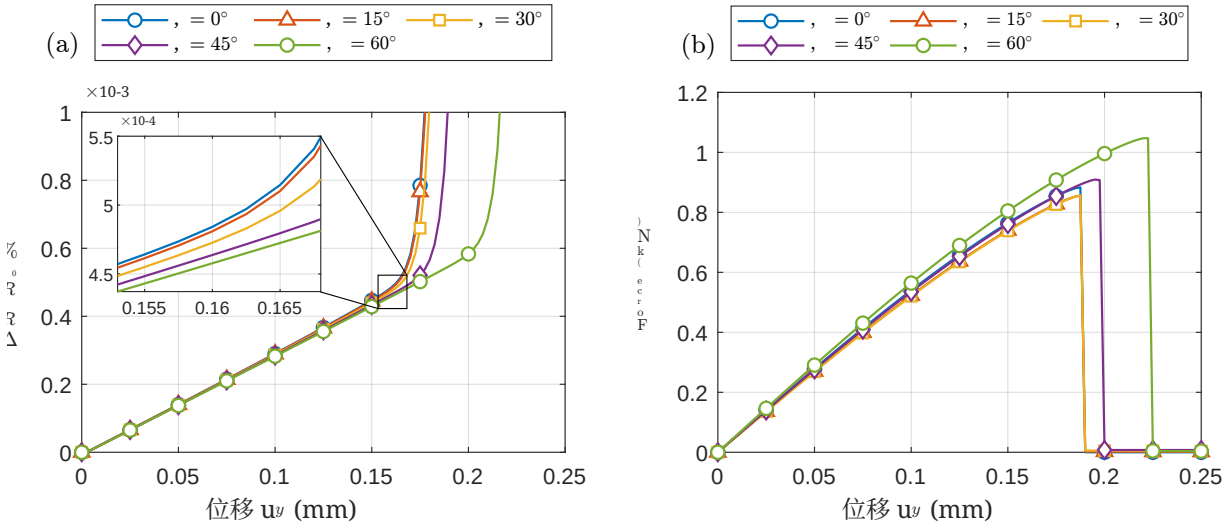


图 12：裂纹角度 α 对以下内容的影响：(a) 相对电阻-位移曲线，以及 (b) 载荷-位移曲线。

图 12 研究了裂纹倾角 α 的影响。图 12a 展示了相对电阻随位移的变化。由图 12b 可知，增大缺口角度 α 会提高极限承载能力和失效临界位移。这是因为随着裂纹

面相对于外加位移方向的投影减小，裂纹尖端处的应力集中也随之减弱（从 I 型断裂转变为混合模式条件）。从试样电阻的相对变化来看，图 12a 也显示了这一效应。随着缺口角度增大，损伤导致的电导率退化会在更大的外加位移下出现。这些结果表明，电阻率测量有助于推断裂纹状缺陷的出现及其几何特性。

4.4. 含有初始裂纹和邻近圆形缺陷的薄板断裂

本案例研究采用与前一个案例完全相同的几何形状，但在缺口周围增加了四个孔洞。本文采用表1中给出的材料参数。模型离散化总计使用了约90,000个自由度，其中相场长度尺度（$\ell = 0.006$ mm）比特征单元尺寸大三倍以上。首先研究了一块具有30度倾斜裂纹的板。图13a显示了两个阶段的相场 ϕ ，在加载过程中，板顶边缘的位移分别为 $u_y = 0.17$ mm和 $u_y = 0.1725$ mm。图13b则显示了断裂过程中的电势 φ 。由图13a可知，板的破坏分为两个阶段。首先，裂纹沿对角线方向从缺口扩展至距离缺口最近的孔洞，随后继续扩展，直至贯穿整块板。最终，当板完全开裂后，电极之间的电流被中断；如图13b中 $u_y = 0.1725$ mm时的等值线图所示，裂纹将电压降从10 V集中至0 V。

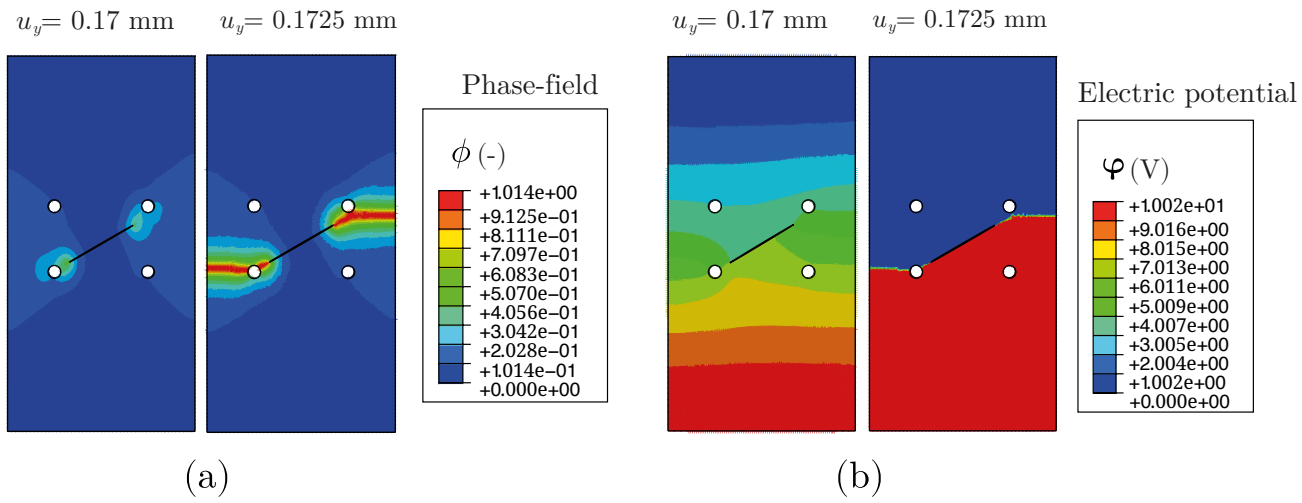


图 13：含有初始裂纹和邻近圆形缺陷的板断裂。不同远场位移下 (a) 相场变量 ϕ 和 (b) 电势 φ 的等值线。裂纹倾角为 $\alpha = 30°$ 时获得的代表性结果。

图14a和b分别从电阻相对变化和板的载荷-位移曲线方面研究了裂纹倾角的影响。结果表明，某些临界角会由于缺口和孔洞周围应力集中的共同作用而导致板提前破坏。 $\alpha = 30°$便属于这种情况，它会导致材料中的电流过早中断，如图14a所示。在该情况下，裂纹在施加位移为 $u_y = 0.1725$ mm时开始扩展，并沿最大能量释放率方向贯穿板扩展，如图13所示。

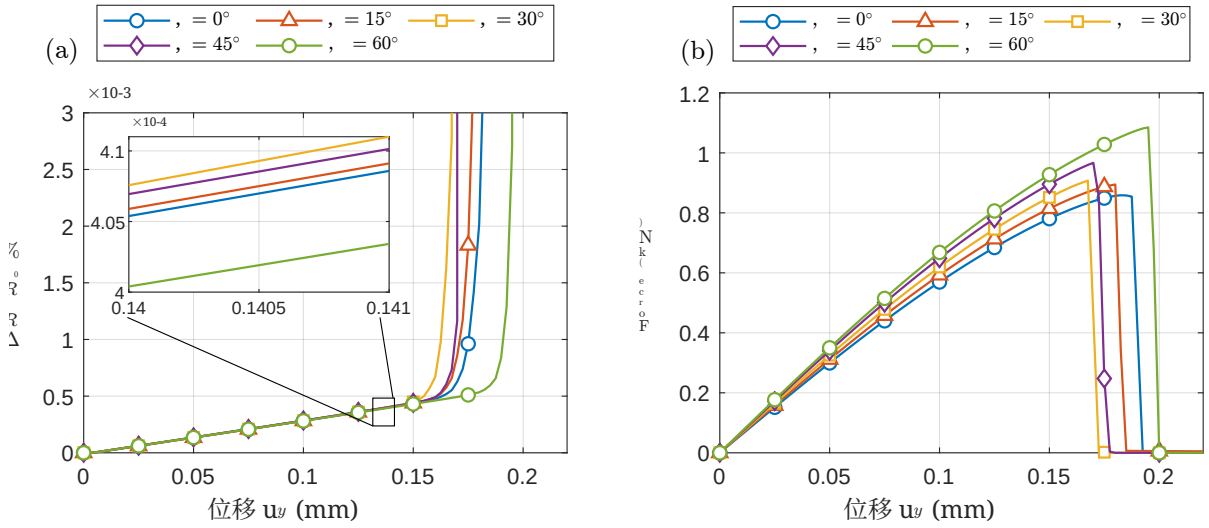


图 14：裂纹倾角对以下因素的影响：(a) 相对电阻 $\Delta R/R_0$ 和 (b) 载荷-位移曲线。

4.5. 含缺陷随机分布的薄板断裂

本案例研究考察了具有缺陷随机分布的碳纳米管增强板的机电响应，如图8c所示。孔洞按照均匀随机分布设置在图8c中红色标示的区域内，直至其总体积达到板总体积的1%。缺陷半径服从正态分布，均值和标准差分别为2 mm和1.2 mm。有限元模型共包含500,000个自由度，相场长度尺度（$\ell = 0.0005$ mm）是特征单元长度的五倍。图15a和b展示了两块缺陷分布不同的试样板失效后的相场和电势等值线图。通过直接蒙特卡洛模拟，以电阻-位移曲线和力-位移曲线的相对变化量来量化机电响应的不确定性，如图16a

和b所示。共进行了21次模拟，极限断裂位移的直方图见图16c。这些结果表明，所提出的方法能够灵活地模拟压阻材料中任意裂纹模式下的裂纹萌生与扩展，并可在无需耗时进行网格自适应的情况下开展不确定性传播分析。

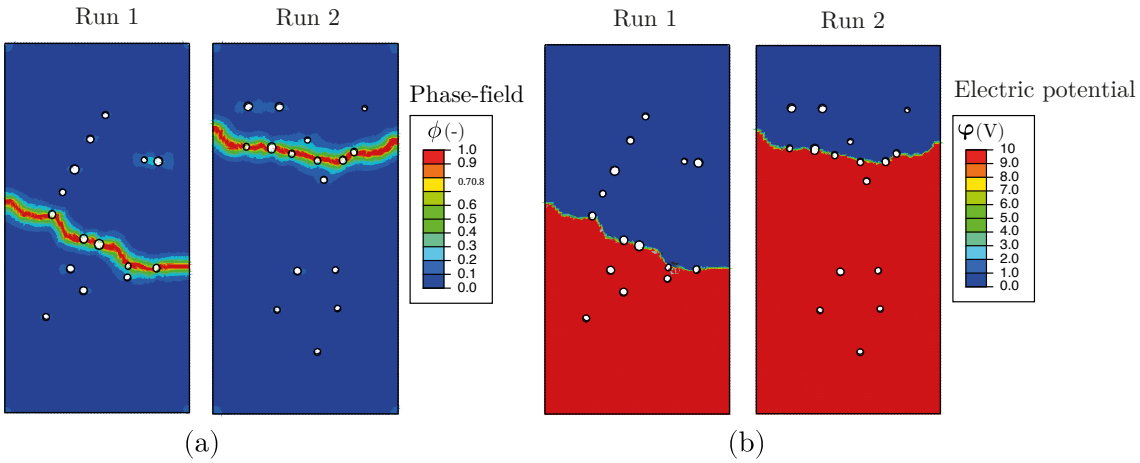


图15：具有缺陷随机分布的碳纳米管/环氧树脂复合板中两组具有代表性的模拟在裂纹扩展后的等值线图：(a) 相场 ϕ，以及 (b) 电势 φ。

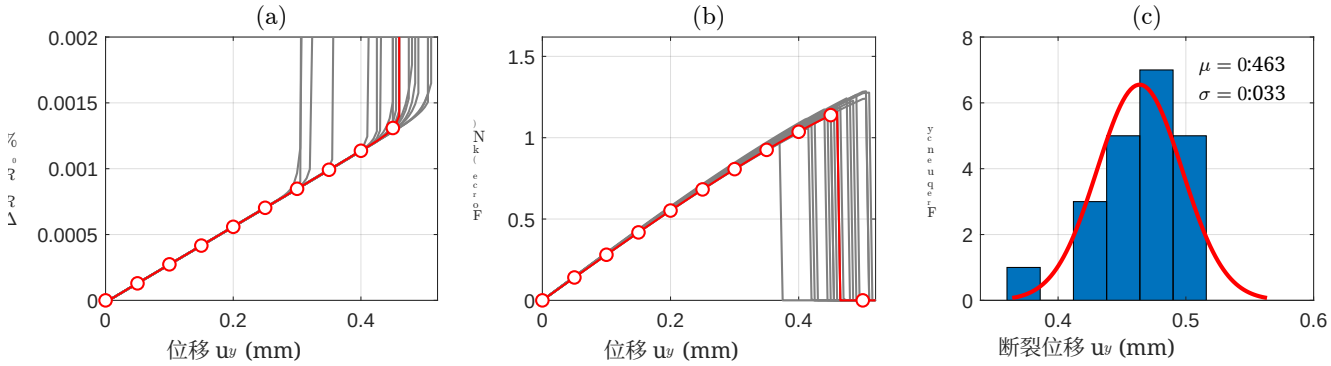
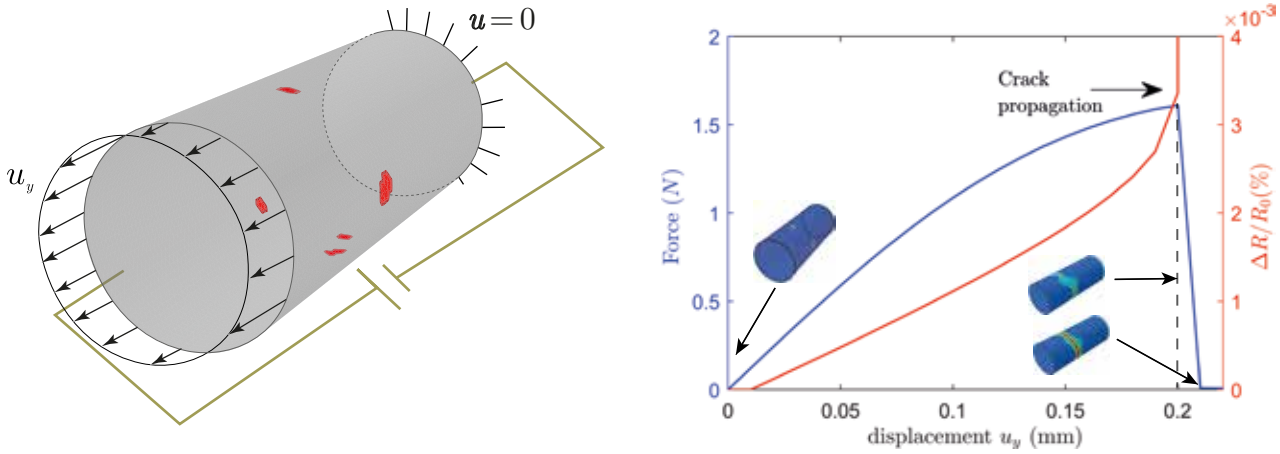


图16：含有缺陷随机分布的板的断裂：(a) 电阻相对变化的概率分析 $\Delta R/R_0$，(b) 具有缺陷随机分布的碳纳米管/环氧树脂复合板的载荷-位移曲线，以及 (c) 极限断裂位移对应的直方图。(a) 和 (b) 中的灰色线和红色线分别表示所进行的蒙特卡洛模拟及其平均值。

4.6. 含裂纹圆柱体中的三维裂纹扩展

最后一个案例研究旨在展示所提出的方法模拟任意几何形状自感知压阻材料机电响应的能力

以及复杂裂纹扩展模式。具体而言，研究了一个半径为 2 cm、长度为 5 cm 的三维圆柱体，如图 17a 所示。试样一端固定，另一端施加受控位移。此外，在圆柱体的两个底面之间施加 10 V 的电势差。通过将相场变量定义为 $\phi = 1$作为初始条件，在圆柱体表面设置五个随机缺口（见图 18a）。本案例研究采用的材料属性取自表1，碳纳米管体积分数为 1%。有限元网格约包含 320,000 个自由度，特征单元长度至少比相场长度尺度（$\ell = 0.001$ mm）小四倍。相场变量和电势的演化如图 18 所示。可以清楚地观察到，相场变量从缺口周围区域开始扩展并逐渐汇合，最终贯穿结构的整个横截面。相应的力-位移曲线以及结构电阻的相对变化如图 17b 的三轴图所示。图中显示，在缺陷开始扩展之前，电阻的相对变化首先呈现由压阻效应主导的准线性行为。缺陷开始扩展后，电阻便按照所采用的退化函数以非线性方式增大。最后，当裂纹完全贯穿结构后，电极之间的电流中断，电阻趋于无穷大。



(a) (b)

图17：碳纳米管/环氧树脂圆柱体三维案例研究的边界条件：(a)以红色突出显示的初始裂纹分布，以及(b)显示电阻相对变化和载荷-位移曲线的三轴图。

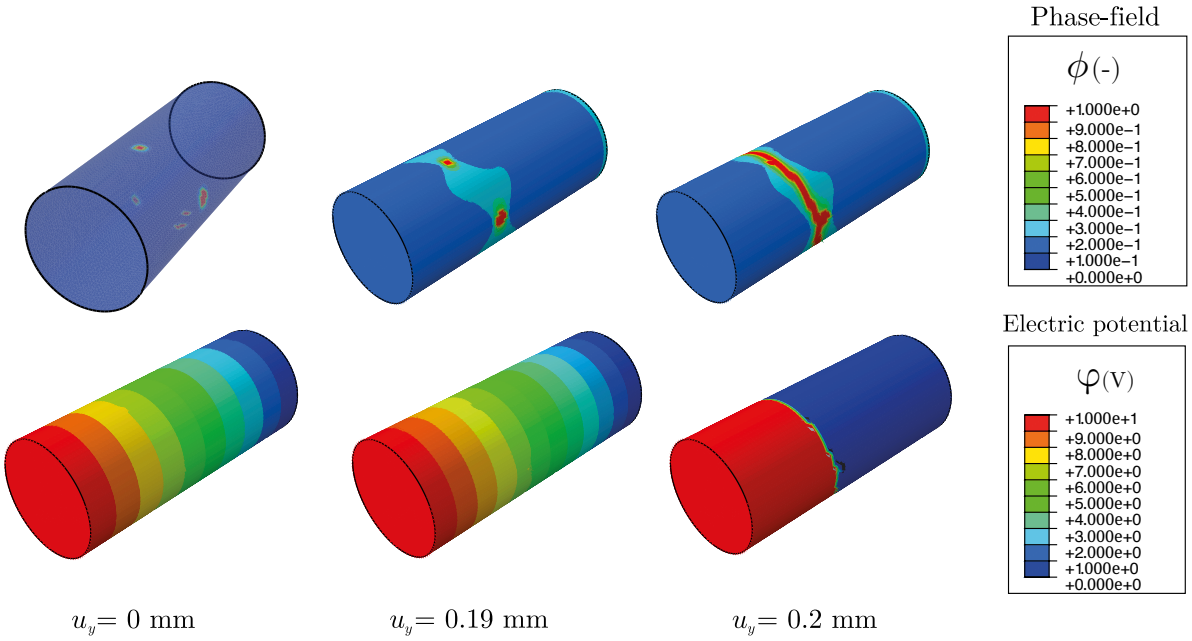


图18：含裂纹圆柱体中的三维裂纹扩展。三维碳纳米管/环氧树脂复合圆柱体中裂纹演化等值线（由相场 ϕ 表示）以及电势 φ 。

5. 总结

我们提出了一种用于模拟压阻复合材料中机电断裂的新型公式。该模型在结构-电学框架内结合了平均场均匀化（MFH）和相场断裂。该公式已针对碳纳米管基复合材料进行了具体化，并采用完整的细观力学框架来估计复合材料的有效本构性能，包括弹性张量、电气电导率和线性压阻张量。所提出的方法能够将宏观响应与复合材料微观结构的基本特征相关联，例如填料体积分数和几何形状，或组成相的单独材料属性。随后，利用线性机电力学和相场方法，推导了线性压阻材料的断裂控制方程。所提出的公式已使用有限元法进行了数值实现，所得代码也已免费提供给科学界。为评估所提出方法的准确性和能力，本文进行了详细的参数分析，并展示了五个复杂程度逐步增加的不同案例研究。所展示的数值结果证明，所提出的方法能够准确且灵活地预测具有一般几何形状并经历任意裂纹扩展模式的智能压阻结构的机电响应。所展示的方-

该公式有望成为一种有价值的计算工具，用于生成准确的数字孪生，从而广泛应用于自诊断复合材料的设计优化以及结构健康监测应用中的信号处理。

致谢

L. Quinteros 感谢国家研究与发展署（ANID）/奖学金计划/DOCTORADO BECAS CHILE/2020 - 72210161 提供的资助。E. Garc´ıa-Mac´ıas 获得安达卢西亚自治区政府经济转型、知识、企业与大学委员会（西班牙）通过研究项目 P18- RT-3128 提供的资助。E. Mart´ınez-Pa˜neda 获得英国研究与创新署未来领袖奖学金资助（项目编号 MR/V024124/1）。

附录A. 基于碳纳米管的复合材料模型

碳纳米管基复合材料的电导率由两种机制决定，即电子跳跃（EH）和导电网络（CN）。电子跳跃的概率取决于管间平均距离 $d_{a,\ \chi}(\boldsymbol{\varepsilon})$，据报道，该距离遵循幂律关系，如 [24],

$$d_{a,\chi}(\varepsilon) = \begin{cases} d_c & \chi = EH \\ d_c \left(\frac{f_c(\varepsilon)}{f(\varepsilon)} \right)^{1/3} & \chi = CN \end{cases} \tag{A.1}$$

其中， d_c 为允许电子转移的碳纳米管之间的最大间距。这种效应可通过在碳纳米管表面涂覆连续界面层，并采用广义西蒙斯公式进行建模，如下所示： [81],

$$R_{int,\chi}\left(\boldsymbol{\varepsilon}, d_{a,\chi}(\boldsymbol{\varepsilon})\right) = \frac{d_{a,\chi}(\boldsymbol{\varepsilon})\hbar^2}{ae^2(2m\lambda)^{1/2}} \exp\left[\frac{4\pi d_{a,\chi}(\boldsymbol{\varepsilon})}{\hbar}(2m\lambda)^{1/2}\right] \tag{A.2}$$

其中， m 和 e 分别为电子的质量和电荷， λ 为隧穿势垒的高度， a 为碳纳米管的接触面积， $\hbar$ 为约化普朗克常数。导电界面相的厚度及其电导率由 [82],给出

$$t_\chi = \frac{1}{2} d_{a,\chi}(\boldsymbol{\varepsilon}), \quad \sigma_{int,\chi} = \frac{d_{a,\chi}(\boldsymbol{\varepsilon})}{aR_{int,\chi}\left(\boldsymbol{\varepsilon}, d_{a,\chi}(\boldsymbol{\varepsilon})\right)}. \tag{A.3}$$

所提出的界面相层被建模为等效复合实心圆柱。因此，有效电导率张量 σ_{eff} 被定义为横向各向同性，并具有有效纵向电导率和

横向电导率，分别记为 $\tilde{\sigma}_{\chi}^{L}$ 和 $\tilde{\sigma}_{\chi}^{T}$。随后，应用麦克斯韦方程组和混合法则，

$$\tilde{\sigma}_{\chi}^{L}(\varepsilon)=\frac{(L+2t_{\chi}(\varepsilon))\,\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)\left[\sigma_{c}^{L}r_{c}^{2}+\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)\left(2r_{c}t_{\chi}(\varepsilon)+t_{\chi}^{2}(\varepsilon)\right)\right]}{2\sigma_{c}^{L}r_{c}^{2}t_{\chi}(\varepsilon)+2\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)\left(2r_{c}t_{\chi}(\varepsilon)+t_{\chi}^{2}(\varepsilon)\right)t_{\chi}(\varepsilon)+\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)L\left(r_{c}+t_{\chi}(\varepsilon)\right)^{2}} \tag{A.4}$$

$$\tilde{\sigma}_{\chi}^{T}(\varepsilon)=\frac{\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)}{L+2t_{\chi}(\varepsilon)}\left[L\frac{2r_{c}^{2}\sigma_{c}^{T}+\left(\sigma_{c}^{T}+\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)\right)\left(t_{\chi}^{2}(\varepsilon)+2r_{c}t_{\chi}(\varepsilon)\right)}{2r_{c}^{2}\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)+\left(\sigma_{c}^{T}+\sigma_{int,\chi}(\varepsilon)\right)\left(t_{\chi}^{2}(\varepsilon)+2r_{c}t_{\chi}(\varepsilon)\right)}+2t_{\chi}(\varepsilon)\right]. \tag{A.5}$$

由于界面相的存在，所得填料比原始填料更大，因此必须将其更新为

，

$$f_{eff,\chi}(\varepsilon)=\frac{\left(r_{c}+t_{\chi}(\varepsilon)\right)^{2}\left(L+2t_{\chi}(\varepsilon)\right)}{r_{c}^{2}L}f(\varepsilon). \tag{A.6}$$

参考文献

[1] H. Zhang, E. Bilotti, T. Peijs, 《碳纳米管在层合复合材料损伤传感与结构健康监测中的应用：综述》, 《纳米复合材料》1 (4) (2015) 167–184。

[2] L. Vertuccio, L. Guadagno, G. Spinelli, P. Lamberti, V. Tucci, S. Russo, 用于飞机主承力结构健康监测的碳纳米管增强树脂的压阻特性, 《复合材料B辑：工程》107 (2016) 192–202。

[3] A. D'Alessandro, M. Rallini, F. Ubertini, A. L. Materazzi, J. M. Kenny, 面向结构健康监测应用的自感知碳纳米管水泥基复合材料可扩展制备工艺研究, 《水泥与混凝土复合材料》65 (2016) 200–213。

[4] E. Garc´ıa-Mac´ıas、A. Downey、A. D'Alessandro、R. Castro-Triguero、S. Laflamme、F. Ubertini, 适用于动态压缩载荷条件下智能纳米复合水泥基传感器的增强型集总电路模型, 《传感器与执行器A辑：物理》260（2017年），45–57。

[5]A. Meoni、A. D'Alessandro、A. Downey、E. Garc´ıa-Mac´ıas、M. Rallini、A. L. Materazzi、L. Torre、S. Laflamme、R. Castro-Triguero、F. Ubertini, 掺杂碳纳米管、可嵌入式智能混凝土传感器静态和动态应变灵敏度的实验研究：用于大型结构的结构健康监测, 《Sensors》18（3）（2018年）。

[6] T. Yamada、Y. Hayamizu、Y. Yamamoto、Y. Yomogida、A. Izadi-Najafabadi、D. N. Futaba、K. Hata, 用于人体运动检测的可拉伸碳纳米管应变传感器, 《自然·纳米技术》6(5)（2011）296–301。

[7] X. Cao、X. Wei、G. Li、C. Hu、K. Dai、J. Guo、G. Zheng、C. Liu、C. Shen、Z. Guo，碳纳米管环氧纳米复合材料在循环变形下的应变传感行为，《Polymer》112（2017年）1–9。

[8] N.Hu, Y. Karube, M. Arai, T. Watanabe, C. Yan, Y. Li, Y. Liu, H. Fukunaga，聚合物/碳纳米管复合应变传感器灵敏度研究，《碳》48 (3) (2010) 680–687。

[9] A. Kausar, I. Rafique, B. Muhammad，聚合物/碳纳米管和环氧树脂/碳纳米管复合材料应用综述，《Polymer-Plastics Technology and Engineering》55 (11) (2016) 1167–1191。

[10] V. K. Vadlamani, V. B. Chalivendra, A. Shukla, S. Yang，拉伸载荷下嵌入碳纳米管和炭黑的环氧树脂中的损伤传感，《Polymer Composites》33(10) (2012) 1809–1815。

[11] H.B. Birgin, S. Laflamme, A. D'Alessandro, E. Garcia-Macias, F. Ubertini，基于导电水泥基材料的智能路面动态称重表征算法，《Sensors》20 (3) (2020)。

[12] S. Frankland、V. Harik、G. Odegard、D. Brenner、T. Gates，基于分子动力学模拟的聚合物–纳米管复合材料应力–应变行为，《Composites Science and Technology》63 (11) (2003) 1655–1661。

[13] M. Griebel、J. Hamaekers，聚合物–碳纳米管复合材料弹性模量的分子动力学模拟，Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 193 (17) (2004) 1773–1788。

[14] T. Natsuki、K. Tantrakarn、M. Endo，碳纳米管结构对力学性能的影响，《Applied Physics A》79 (1) (2004) 117–124。

[15] E. Garc´ıa-Mac´ıas、C. F. Guzm´an、E. I. Saavedra Flores、R. Castro-Triguero，《碳纳米管增强聚合物》弹性模量的多尺度建模，以及扩展混合法则应用中效率参数的拟合，《复合材料B辑：工程》159（2019年）114–131。

[16] E. Garc´ıa-Mac´ıas、R. Castro-Triguero、F. Ubertini，掺入椭球形颗粒并考虑界面效应的部分饱和多孔复合材料两步分层微观力学模型，《复合材料B辑：工程》148（2018年）49–60。[17]E. Garc´ıa-Mac´ıas、L. Rodr´ıguez-Tembleque、R. Castro-Triguero、A. S´aez，基于 Eshelby-Mori-Tanaka 方法的轴向受压功能梯度碳纳米管/聚合物复合材料圆柱板屈曲后分析，《复合材料B辑：工程》128（2017年）208–224。[18] M. Hori、S. Nemat-Nasser，多相复合材料的双夹杂模型与总体模量，《材料力学》14（3）（1993年）189–206。[19] W. Xu、F. Wu、Y. Jiao、M. Liu，用于设计具有界面性能的非球形纳米及微米颗粒增强复合材料的有效模量通用微观力学框架，《材料与设计》127（2017年）162–172。[20] S. Wen、D. Chung，碳纤维增强水泥基材料导电中的双重渗流，《碳》45（2）（2007年）263–267。[21] M. Chiarello、R. Zinno，自监测碳纤维增强混凝土的电导率，《水泥与混凝土复合材料》27（4）（2005年）463–469。[22] A. Govorov、D. Wentzel、S. Miller、A. Kanaan、I. Sevostianov，承受压缩载荷的环氧树脂-石墨烯和环氧树脂-碳纳米纤维复合材料的电导率，《国际工程科学杂志》123（2018年）174–180。[23] D. Wentzel、S. Miller、I. Sevostianov，石墨烯增强环氧树脂电导率对应力水平的依赖关系，《国际工程科学杂志》120（2017年）63–70。[24] C. Feng、L. Jiang，碳纳米管（CNT）-聚合物纳米复合材料电导率的微观力学建模，《复合材料A：应用科学与制造》47（2013年）143–149。[25] E. Garc´ıa-Mac´ıas、A. D’Alessandro、R. Castro-Triguero、D. P´erez-Mira、F. Ubertini，碳纳米管水泥基复合材料电导率的微观力学建模，《复合材料B辑：工程》108（2017年）451–469。

[26] E. Garc´ıa-Mac´ıas, A.D'Alessandro, R.Castro-Triguero, D.P´erez-Mira, F.Ubertini,《碳纳米管水泥基复合材料单轴应变传感特性的微观力学建模及其在结构健康监测应用中的研究》，《Composite Structures》163 (2017年) 195–215。

[27] V. Mirjalili, P. Hubert, 《碳纳米管桥联效应对聚合物增韧的建模及实验验证》，《Composites Science and Technology》70 (10)(2010) 1537–1543。

[28] S.-Y. Fu, B. Lauke, 《纤维长度和纤维取向分布对短纤维增强聚合物拉伸强度的影响》，《Composites Science and Technology》56 (10) (1996) 1179–1190。

[29] C. Menna, C. E. Bakis, A. Prota, 《纳米填料长度和取向分布对单向纤维复合材料I型断裂韧度的影响》，《复合材料杂志》50 (10) (2016) 1331–1352。

[30] A. Negi、G. Bhardwaj、J. S. Saini、K. Khanna、R. K. Godara，采用扩展有限元法分析存在不连续性的碳纳米管增强聚合物纳米复合材料板，《理论与应用断裂力学》103（2019）102292。

[31]A. Downey、A. D'Alessandro、M. Baquera、E. Garc´ıa-Mac´ıas、D. Rolfes、F. Ubertini、S. Laflamme、R. Castro-Triguero，采用电阻网格模型对导电智能混凝土结构中的损伤进行检测、定位和定量，《工程结构》148（2017年）924–935。

[32] L. Rodr´ıguez-Tembleque、F. Garc´ıa-S´anchez、E. Garc´ıa-Mac´ıas、F. Buroni、A. S´aez，裂纹诱发的开裂碳纳米管增强复合材料电阻率变化，《理论与应用断裂力学》106（2020）102470。

[33] L. Rodr´íguez-Tembleque, J. Vargas, E. Garc´ía-Mac´ías, F. Buroni, A. S´áez, 《基于 ANSYS 的自感知碳纳米管增强聚合物纳米复合材料板扩展有限元裂纹扩展虚拟监测》，《Composite Structures》284 (2022) 115137。

[34] M. J. Borden、C. V. Verhoosel、M. A. Scott、T. J. R. Hughes、C. M. Landis, 《动态脆性断裂的相场描述》，《计算力学与工程方法》217–220 (2012) 77–95。

[35] M. J. Borden、T. J. R. Hughes、C. M. Landis、C. V. Verhoosel, 《脆性断裂的高阶相场模型：等几何分析框架下的公式推导与分析》, 《计算力学与工程方法》273 (2014) 100–118。

[36] M. J. Borden, T. J. R. Hughes, C. M. Landis, A. Anvari, I. J. Lee, 《延性材料断裂的相场公式：有限变形平衡定律的推导、塑性退化及应力三轴度效应》, 《计算力学与工程方法》312 (2016) 130–166。

[37] J.-Y. Wu, V.P. Nguyen, C.T.Nguyen, D.Sutula, S.Sinaie, S.Bordas, 《断裂的相场建模》, 《应用力学进展》53 (2020) 1–183。

[38] E. Mart´ınez-Pa˜neda, A. Golahmar, C. F. Niordson, 《氢致开裂的相场公式》, 《计算力学与工程方法》342 (2018)742– 761。

[39] J.-Y. Wu, T. K. Mandal, V. P. Nguyen, 《氢辅助开裂的相场正则化内聚区模型》, 《计算力学与工程方法》358 (2020) 112614。

[40] M. Dinachandra, A. Alankar, 《氢脆驱动的相场断裂自适应有限元建模》, 《计算力学与工程方法》391 (2022) 114509。

[41] M.Simoes, C. Braithwaite, A. Makaya, E.Mart´ınez-Pa˜neda, 《形状记忆合金中的疲劳裂纹扩展建模》, Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures 45 (4) (2022) 1243–1257。

[42] M. Simoes，E. Mart´ınez-Pa˜neda，形状记忆合金的断裂与疲劳相场建模, 《计算力学与工程方法》373（2021）113504。[43] W. Tan，E. Mart´ınez-Pa˜neda，复合材料微观桥接行为的相场断裂预测, 《复合材料结构》286（2022）115242。[44] A. Quintanas-Corominas, A. Turon，J. Reinoso，E. Casoni，M. Paggi，J. A. Mayugo，采用内聚区模型增强的相场方法：对基体开裂诱发分层的建模, 《计算力学与工程方法》358（2020）112618。

[45] X. Sun，R. Duddu，Hirshikesh，冰川裂隙水力压裂的孔隙损伤相场模型，Extreme Mechanics Letters 45（2021）101277。

[46] T. Clayton, R. Duddu, M. Siegert, E. Mart´ınez-Pa˜neda，基于应力的孔隙损伤相场模型：蠕动冰川和冰架的水力压裂，Engineering Fracture Mechanics 272 (2022) 108693。

[47] X. Zhang, A. Krischok, C. Linder，建立变分框架以模拟扩散诱导的大塑性变形，以及硅电极初始两相嵌锂过程中的相场断裂，《计算力学与工程方法》312 (2016) 51–77，《相场断裂方法》。

[48] A. M. Boyce, E. Mart´ınez-Pa˜neda, A. Wade, Y. S. Zhang, J. J. Bailey, T. M. Heenan, D. J. Brett, P. R. Shearing，基于 X 射线计算机断层扫描和建模预测锂离子电池电极开裂，《电源杂志》526 (2022) 231119。

[49] W. Ai, B. Wu, E. Mart´ınez-Pa˜neda，锂离子电池电极颗粒疲劳开裂建模的耦合相场公式，Journal of Power Sources 544（2022）231805。

[50] L. Quinteros, E.Garc´ıa-Mac´ıas, E.Mart´ınez-Pa˜neda，基于细观力学的碳纳米管复合材料相场断裂建模，《复合材料B辑：工程》236（2022）109788。

[51] Z. A. Wilson, M. J. Borden, C. M. Landis，压电陶瓷断裂相场模型，International Journal of Fracture 183（2）（2013年）135–153。

[52] C. Miehe, F. Welschinger, M. Hofacker，机电断裂相场模型，Journal of the Mechanics and Physics of Solids 58（10）（2010）1716–1740。

[53] A. Abdollahi, I. Arias，具有不同机电裂纹条件的压电和铁电材料中裂纹扩展的相场建模，Journal of the Mechanics and Physics of Solids 60 (12) (2012) 2100–2126。

[54] J. Wu，W. Chen，《压电固体中机电断裂的相场建模：解析结果与数值模拟》，《计算力学与工程方法》387（2021）114125。

[55] R. Rafiee，R. M. Moghadam，关于碳纳米管建模：批判性综述，《Composites Part B: Engineering》56（2014）435–449。[56] W. Xu，H. Ma，S. Ji，H. Chen，具有各向异性颗粒周围软界面的颗粒复合材料的解析有效弹性性能，《Composites Science and Technology》129（2016）10–18。[57] J. K. Beddow，《技术中的颗粒表征：第二卷：形态分析》，CRC出版社，2018年。[58] L. Sun，R. F. Gibson，F. Gordaninejad，J. Suhr，纳米复合材料的能量吸收能力：综述，《Composites Science and Technology》69（14）（2009）2392–2409，第十六届国际复合材料会议常规论文。[59] M. H. Wichmann，K. Schulte，H. D. Wagner，关于纳米复合材料韧性，《Composites Science and Technology》68（1）（2008）329–331。

[60] A. H. Barber, S. R. Cohen, H. D. Wagner，碳纳米管–聚合物界面强度的测量，《应用物理快报》82 (23) (2003) 4140–4142。

[61] V. C. Li, Y. Wang, S. Backer，短切随机纤维增强脆性基体复合材料拉伸软化与桥联增韧的微观力学模型，《固体力学与物理学杂志》39 (5) (1991) 607–625。[62] S. Y. Fu, B. Lauke，取向错乱短纤维复合材料的纤维拔出能，《材料科学杂志》32 (8) (1997) 1985–1993。[63] L. Jain, R. Wetherhold，纤维取向对脆性基体复合材料断裂韧性的影响，《冶金学与材料学报》40 (6) (1992) 1135–1143。[64] M. Xia, H. Hamada, Z. Maekawa，注塑玻璃纤维增强热塑性塑料的弯曲刚度，《国际聚合物加工》10 (1) (1995) 74–81。[65] F. Deng, Q. S. Zheng，碳纳米管复合材料有效电导率的解析模型，《应用物理快报》92 (7) (2008) 071902。[66] F. C. Buroni, E. Garc´ıa-Mac´ıas，具有渗流型行为的短纤维增强复合材料压阻特性的闭式解，《碳》184 (2021) 923–940。

[67] J. D. Eshelby, R. E. Peierls，椭球形夹杂弹性场的确定及相关问题，《伦敦皇家学会会刊 A辑：数学与物理科学》241 (1226) (1957) 376–396。[68] J. D. Eshelby, R. E. Peierls，椭球形夹杂外部的弹性场，《伦敦皇家学会会刊 A辑：数学与物理科学》252 (1271) (1959) 561–569。[69] E. Garc´ıa-Mac´ıas, R. Castro-Triguero, A. S´aez, F. Ubertini，压阻式碳纳米管智能混凝土的三维混合微观力学有限元建模，《计算力学与工程方法》340 (2018年) 396–423。[70] T. Komori, K. Makishima，一般纤维集合体中的纤维间接触数量，《纺织研究杂志》47 (1) (1977) 13–17。

[71] B. Bourdin、G. Francfort、J.-J. Marigo，《重新审视脆性断裂的数值实验》，Journal of the Mechanics and Physics of Solids 48(4) (2000) 797–826。

[72] P. K. Kristensen、C. F. Niordson、E. Mart´ınez-Pa˜neda，《相场断裂评估：裂纹萌生与扩展》，Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 379 (2203) (2021) 20210021。

[73] A. A. Griffith，《固体中的断裂与流动现象》，Philosophical Transactions A, 221 (1920) 163–198。

[74] G. A. Francfort、J.-J. Marigo，《将脆性断裂重新视为能量最小化问题》，Journal of the Mechanics and Physics of Solids 46 (8) (1998) 1319–1342。

[75] Z. Khalil, A. Y. Elghazouli, E. Mart´ınez-Pa˜neda，针对弹塑性固体疲劳裂纹扩展的广义相场模型及高效整体求解器，《计算力学与工程方法》388 (2022) 114286。[76] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welschinger，速率无关裂纹扩展的相场模型：基于算子分裂的稳健算法实现，《计算力学与工程方法》199 (45) (2010) 2765–2778。

[77] P. K. Kristensen, E. Mart´ınez-Pa˜neda，采用拟牛顿方法和新的自适应步长方案进行相场断裂建模，《理论与应用断裂力学》107 (2020) 102446。

[78] J.-Y. Wu、Y. Huang、V. P. Nguyen，《统一相场损伤理论的 BFGS整体算法》，《计算力学与工程方法》360 (2020) 112704。

[79] A. Esmaeili、C. Sbarufatti、A. Jim´enez-Su´arez、A. Urena、A. M. Hamouda，《采用单壁碳纳米管-双壁碳纳米管的环氧树脂基纳米复合材料在拉伸和断裂试验中的压阻特性表征》，《Polymer Composites》41 (7) (2020) 2598–2609。

[80] E. Garc´ıa-Mac´ıas、L. Rodr´ıguez-Tembleque、A. S´aez，《用于梁状结构屈曲检测的多壁碳纳米管/环氧条带状传感器》，《薄壁结构》133 (2018年) 27–41。[81] J. G. Simmons，《相似电极之间隔有薄绝缘薄膜时电隧穿效应的广义公式》，《应用物理学杂志》34 (6) (1963) 1793–1803。

[82] G. D. Seidel，D. C. Lagoudas，纳米管-聚合物纳米复合材料电导率的细观力学模型，《复合材料杂志》43（9）（2009）917–941。