arXiv:2603.13190v1 [cs.CE] 13 Mar 2026

格子离散颗粒模型（LDPM）：各种时间积分求解器及其实现的比较

Erol Lale[1,14], Jan Eli´aˇs*[2], Ke Yu[1], Matthew Troemner†[3], Monika Stˇredulov´a[2], Julien Khoury[4],Tianju Xue[5], Ioannis Koutromanos[6], Alessandro Fascetti[7], Bahar Ayhan[1,14], Baixi Chen[7],Giovanni Di Luzio[8],Yuhui Lyu[9],Madura Pathirage[10],Gilles Pijaudier-Cabot[4],Lei Shen[11],Alessandro Tasora[12], Lifu Yang[13], Jiawei Zhong[5], 和 Gianluca Cusatis[11]美国伊利诺伊州埃文斯顿，西北大学土木与环境工程系，邮编 60208[2]捷克布尔诺理工大学土木工程学院结构力学研究所，邮编 60200[3]美国伊利诺伊州威尔梅特，Cusatis Computational Services Inc，邮编 60091[4]法国国家科学研究中心 LFCR，波城和阿杜尔河地区大学，昂格莱蒙托里公园大道，邮编 64600[5]中国香港清水湾，香港科技大学土木与环境工程系，邮编 999077[6]美国弗吉尼亚州布莱克斯堡，弗吉尼亚理工大学土木与环境工程系，邮编 24061[7]美国宾夕法尼亚州匹兹堡，匹兹堡大学土木与环境工程系，邮编 15261[8]意大利米兰理工大学土木与环境工程系，邮编 20133[9]中国香港，香港大学土木工程系，邮编 999077[10]美国新墨西哥州阿尔伯克基，新墨西哥大学 Gerald May 土木、建筑与环境工程系，邮编 87131[11]中国南京，河海大学水利水电工程学院，邮编 210098[12]意大利帕尔马大学工业系统与技术工程系，邮编 43121[13]中国香港，香港城市大学建筑与土木工程系，邮编 999077[14]土耳其伊斯坦布尔，伊斯坦布尔技术大学土木工程系，邮编 34469

2026年3月16日

摘要

本文比较了格子离散颗粒模型（LDPM）在混凝土及其他非均质准脆性材料数值模拟中的各种实现。这一比较涉及瞬态隐式和显式求解器，以及中央处理器（CPU）和图形处理器（GPU）上的稳态（静力）求解器与实现。各种实现

*通讯作者：jan.elias@vut.cz
†Troemner博士在西北大学攻读博士期间完成了与第3.1节相关的工作 y.

根据一组描述复杂程度逐渐增加的基准测试，对这些方法进行了比较。测试包括弹性振动、受限应变硬化压缩响应、拉伸断裂以及无侧限应变软化压缩响应。从模拟中提取的指标包括宏观应力-应变响应、计算时间、迭代次数和能量平衡误差。通过裂纹张开向量的相关系数和归一化均方根误差，对最终裂纹形态进行两两比较。此外，对于数值上最具挑战性的无侧限压缩滑移边界条件案例，通过扰动解以及改变收敛准则和时间步长，测试应变软化响应的稳定性。本文附有基准测试的完整输入数据，研究人员可据此运行示例，并与自己的实现进行比较。此外，文中报告的大多数实现均可通过开源软件包公开获取。

关键词

格子离散颗粒模型；LDPM；软化；非均质性；断裂；非弹性；显式求解器；隐式求解器。

1 引言

格子离散颗粒模型（LDPM）在主要非均质性的长度尺度上模拟非均质材料，例如混凝土中的粗骨料颗粒 [1], 砂浆中的细骨料颗粒 [2], 或岩石中的颗粒 [3, 4, 5]。通过根据给定的颗粒尺寸分布随机布置颗粒 [1,6] （图 1a），对颗粒中心进行德劳内四面体剖分，并采用相关的定制镶嵌，适用于一般几何形状的LDPM系统由一组三维多面体单元组成，每个单元代表所模拟的非均质性及一层嵌入基体（图1b）。相邻的多面体单元通过共享的三角形面片相互作用，这些面片被认为代表材料在载荷作用下响应中裂纹及其他非线性特征的潜在位置（图 1b）。

LDPM 的公式建立在八十年代末期开始发展的晶格 [7, 8, 9, 10, 11] 与颗粒 [12, 13, 14, 15,16, 17] 拉伸断裂模型的开创性研究基础之上。随后，这项研究在约束剪切晶格（CSL）模型的公式中得到拓展，使其还能模拟压缩断裂，以及受限压缩条件下从应变软化到应变硬化的转变 [18, 19]。

过去二十年间，LDPM 已应用于各种不同领域，包括但不限于混凝土准静态断裂与损伤 [20, 21, 22], 、混凝土动态断裂 [23, 2], 、钢筋混凝土构件模拟 [24, 25, 26], 以及混凝土劣化与老化 [27, 28]。此外，LDPM 还可便捷地与离散模型耦合，用于模拟质量传输和热传递 [4, 29,30, 31] ，以求解多物理场孔隙力学问题；在这些问题中，力学行为，尤其是开裂，与孔隙压力和温度的影响完全耦合 [32]。

LDPM 的预测能力优于其他连续介质模型，因为它自动具备与材料非均质性相联系的材料长度尺度。这使其能够模拟非局部效应对软化行为的影响，而不会产生数值伪影，也无需面对非局部梯度模型或积分模型带来的计算复杂性 [33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40]。

传统上，LDPM 一直采用显式 时间积分求解器实现。具体而言，中心差分格式已成功应用于许多不同的研究中 [20, 24]。显式实现避免了隐式 算法常见的收敛问题；当存在应变软化时，这类问题总会妨碍模拟效率 [41]。然而，用于求解微分方程 [42, 43, 44] 的显式格式只有条件稳定性。对于典型的混凝土 LDPM 系统，稳定时间步长约为 10^{-7}秒。因此，在大多数情况下，模拟总时长只能达到几秒。当然，对于持续时间约为 10^{-2} 秒量级的强冲击荷载响应模拟而言，这并不是问题。然而，对于持续数分钟甚至更长时间的准静态加载应用模拟，这无疑会成为问题；对于持续数十年的持续加载模拟，问题则更加突出。因此，人们不得不采用各种变通方法，使用显式 求解器计算对应于远高于实际加载速率的加载速率的解 [45, 23, 46]。先前的研究采用“真实”时间与“模拟”时间之间的映射，使本构方程能够根据材料在“真实”应变率下的响应进行计算 [32]。如果动能 E_{k} 与内能 W_{int} 的比值低于约 10^{-3} 量级的阈值，则认为采用人为提高加载速率的准静态模拟具有现实性。

另一方面，隐式 求解器具有无条件稳定性，因此可以采用大得多的时间步长，对准静态和持续加载条件下的响应进行时间积分。然而，对于具有多个应变软化响应位置的响应，每一步迭代算法的收敛可能会变得极其缓慢，甚至失败。隐式求解器的另一项复杂之处在于，必须组装某种形式的刚度矩阵并设定收敛准则。文献中已有关于 LDPM 或类似模型的隐式 求解器实现的报道，涵盖稳态和瞬态阶段 [47,48, 49, 50]。

本研究的主要目标是比较多种隐式 和显式 求解器在不同软件包中的实现性能，这些求解器用于求解 LDPM 运动方程。比较针对五种计算复杂度逐步提高的典型试验展开：(i) 自由弹性振动；(ii) 受限压缩试验，其表现为宏观硬化响应和弥散的材料非弹性行为；(iii) 带缺口试样的三点弯曲试验；(iv) 哑铃形试样的直接拉伸，其表现为宏观软化响应并伴随一条宏观裂纹的扩展；以及 (v) 无侧限压缩试验，其特点是宏观软化响应和复杂裂纹模式的扩展。

本文表明，即使在加载过程中会产生大量裂纹、非线性行为极其复杂的情况下，隐式 求解器仍可成功用于 LDPM 模拟。本文说明了在何种情况下隐式 时间积分比显式时间积分更具优势，以及何时情况相反。此外，本文及其相关数据可作为教程，用于验证未来的 LDPM 实现。

2 LDPM 控制方程

LDPM 采用刚体运动学来定义相邻多面体单元界面处的应变度量。这些应变度量（式 1）是在每个面片的质心处 k 通过位移跳跃$[\![\mathbf{u}]\!]_k$计算得到的，位移跳跃由相邻节点 I 和 J的平移$\mathbf{u}$ 与转动 θ （自由度，DoF）确定，并在投影面片坐标系中进行计算，以避免纯剪切时出现非对称行为 [1, 51]。可得

$$\mathbf{e}_k = \frac{1}{l_k}\mathbf{P}_k^{\intercal}\cdot[\![\mathbf{u}]\!]_k \tag{1}$$

其中 $[\![\mathbf{u}]\!]_k = \mathbf{u}_J + \boldsymbol{\theta}_J \times \mathbf{c}_k^J - \mathbf{u}_I - \boldsymbol{\theta}_I \times \mathbf{c}_k^I$ 是连接颗粒 I 和 J 的四面体边的长度，$\mathbf{P}_k = [\mathbf{n}_k\ \mathbf{m}_k\ \mathbf{l}_k]$，而 $\mathbf{n}_k$、$\mathbf{m}_k$ 和 $\mathbf{l}_k$ 则定义局部参考系中适当的正交归一向量（图 1d）。法向量 $\mathbf{n}_k$ 与节点 I 和 J 的直线连线方向一致，切向量可任意选取。向量$\mathbf{c}_k^I$ 从节点 I 指向第 k 个面片的质心。LDPM 面片应变恰好对应于应变张量在面片局部参考系上的局部投影 [51]。

平衡由每个多面体单元的线动量和角动量平衡方程强制满足，如方程 (2) 所示

$$\sum_{k\in\mathcal{F}_I} A_k\mathbf{P}_k\cdot\mathbf{t}_k + V_I\mathbf{b} = \mathbf{M}_u^I\cdot\ddot{\mathbf{u}}_I + \mathbf{M}_\theta^I\cdot\ddot{\boldsymbol{\theta}}_I \tag{2a}$$

$$\sum_{k\in\mathcal{F}_I} A_k\mathbf{c}_k^I\times(\mathbf{P}_k\cdot\mathbf{t}_k) + V_I\mathbf{r}_I\times\mathbf{b} = \mathbf{I}_u^I\cdot\ddot{\mathbf{u}}_I + \mathbf{I}_\theta^I\cdot\ddot{\boldsymbol{\theta}}_I \tag{2b}$$

其中， $\mathcal{F}_I$ 包含多面体单元 I 的所有面片， $A_k = A_{0k}\mathbf{n}_k\cdot\mathbf{n}_{k0}$ 是垂直于相应四面体边的面片的投影面积，$\mathbf{n}_{k0}$ 是面片平面的真实法向量， V_I 是单元体积，$\mathbf{r}_I$ 是从颗粒中心到单元质心的向量，$\mathbf{b}$ 是外部体力（在所关注的整个固体体积内为常量），$\mathbf{t}_k$ 是局部参考系中的牵引向量，且$\mathbf{M}_u^I$、$\mathbf{M}_\theta^I$、$\mathbf{I}_u^I$和$\mathbf{I}_\theta^I$ 是该单元的惯性张量。

LDPM控制方程由一组关联牵引力与应变的向量本构方程补充完整：$\mathbf{t}_k = \mathbf{T}(\mathbf{e}_k,\mathbf{s}_k,\mathbf{p})$，其中$\mathbf{s}_k$ 是内部变量向量，$\mathbf{p}$ 是模型参数向量。在弹性阶段，有$\mathbf{t}_k = \mathbf{E}\cdot\mathbf{e}_k$ ，其中$\mathbf{E} = E_0\mathbf{diag}(1\ \alpha\ \alpha)$， E_0 和 α 是模型参数，分别称为有效法向模量和剪切-法向耦合参数。先前的研究已成功构建并验证了适用于混凝土和其他准脆性材料的LDPM非线性非弹性本构方程；有兴趣的读者可参阅相关研究以了解更多信息。A reports

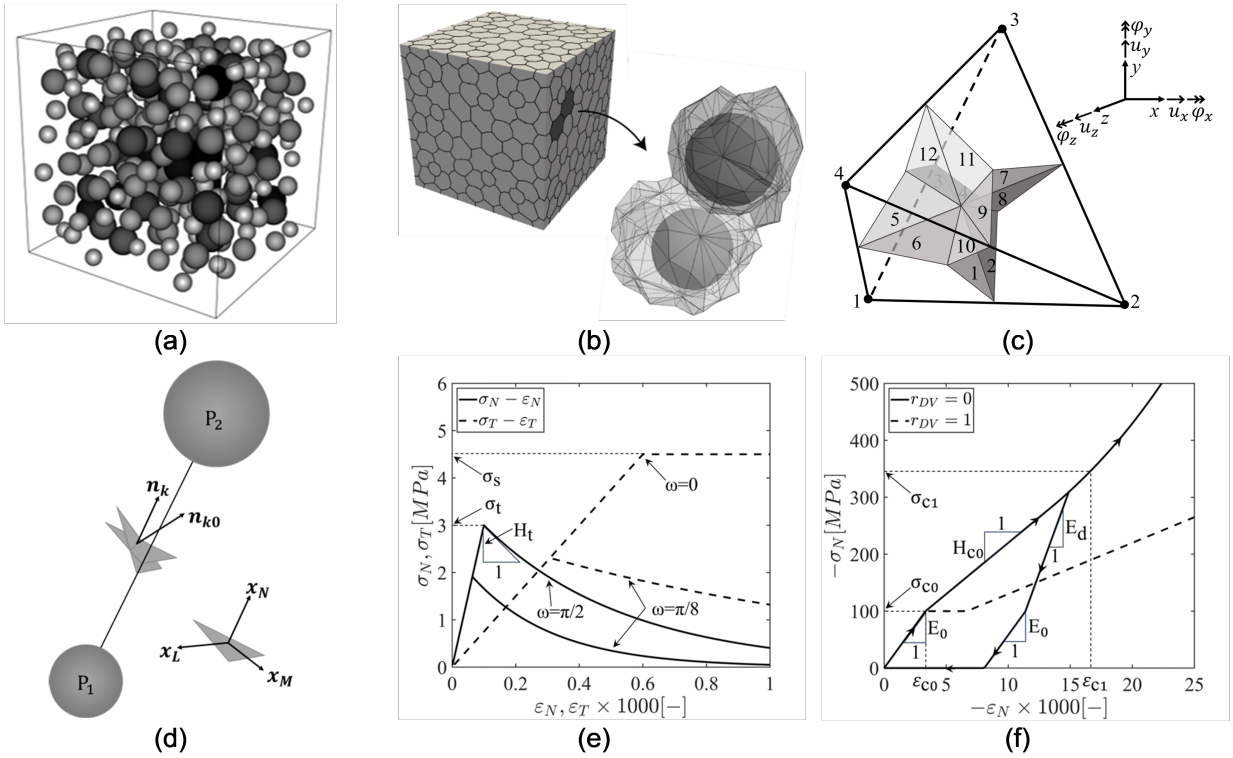

图 1：(a) 按照放置程序排列在立方体几何中的 LDPM 颗粒；(b) 由单个颗粒及其周围面片组成的一组 LDPM 多面体单元；(c) 一组四个 LDPM 颗粒及其对应的面片；(d) 原始 LDPM 面片及其投影；(e) LDPM 面片层级上典型的牵引力-应变曲线；(d) 压缩状态下典型的法向牵引力-法向应变曲线。

本文采用了参考文献 [52] 中构建的非线性本构方程。图1e和f分别展示了根据所采用的LDPM本构方程得到的面片牵引力与应变响应示例，对应拉伸-剪切和压缩。图1e中出现的变量 ω 由表达式tan(ω) $= e_N/[\alpha\left(e_M^2 + e_L^2\right)]^{1/2}$定义； $\omega = 0$ 模拟纯剪切； $\omega = \pi/2$ 模拟纯拉伸； $0 < \omega < \pi/2$则对应混合模式加载条件。

3 数值实现

LDPM 可方便地参照其底层 Delaunay四面体网格，在传统有限元程序中实现。每个 LDPM 四面体单元由 4 个具有转动和平移自由度的节点组成，并划分为 12 个面片（图 1c）。已有多篇文献 [1,20, 53]详细推导了 LDPM 四面体单元的刚度矩阵、质量矩阵和力向量，为简洁起见，此处不再赘述。本文介绍的所有数值实现均基于拉格朗日公式，并假设小应变、小位移和小转动。

组装所有 LDPM 四面体单元后，LDPM 系统的运动方程一般形式可写为

$$\mathbf{M} \cdot \ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{f}_{\text{int}}(\mathbf{q}) = \mathbf{f}_{\text{ext}} \tag{3}$$

其中，$\mathbf{M}$、$\mathbf{f}_{\text{int}}$、$\mathbf{f}_{\text{ext}}$ 和 $\mathbf{q}$ 分别表示质量矩阵、内力、外力以及自由度向量（由 $\mathbf{u}$ 和 θ 组合而成）。在弹性情况下，$\mathbf{f}_{\text{int}} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{q}$，其中 $\mathbf{K}$ 为刚度矩阵（势能的海森矩阵）。质量矩阵可以是一致的 [54, 1] ，也可以进行对角化，后者只需保留一致质量矩阵的对角项即可。非对角项在集中

质量矩阵中被省略　矩阵，因为将它们加到对角项中并不合适，因为它们具有
不同的单位。

3.1 LDPM 网格生成

本研究中进行的所有模拟均依赖于 NU-FreeCAD[1]提供的 LDPM 几何输入。FreeCAD 是一款开源的参数化三维 CAD 建模器，适用于各种工程和设计任务。其模块化构造使其能够在 Windows、macOS 和 Linux 上运行，并兼容多种文件格式。其 Python 脚本集成功能提供了强大的自定义和自动化能力，使 FreeCAD 成为创建专用工作流程的可行后端工具，而这类工作流程对于研发环境至关重要 [55]。这种 Python 集成还进一步拓展了其用途，能够满足从初学者到专家等不同用户的需求 [56]。该 Python 后端已被用于 LDPM 模拟的模型开发。通过各种 Python 脚本，文献 [1] 中概述的颗粒放置、网格划分和镶嵌过程得以重现并实现泛化。
NU-FreeCAD 预处理器依据 BSD 三条款许可证免费[2]发布。

打开启用了 NU-FreeCAD 的 FreeCAD 版本后，系统会提示用户使用新增的工作台来实现 LDPM 功能。对于传统混凝土，所有必要的输入参数（如 [1] 所述）包括水灰比、 w/c、水泥含量、 c、最大骨料粒径、 d_a、最小颗粒尺寸、 d_0 以及骨料筛分曲线。骨料筛分曲线可以用分段线性曲线 [57] 表示，也可以通过富勒曲线的拟合指数给出。

内置工具可执行简单的网格划分，而更复杂的 LDPM 专用网格构建算法则是专门开发的。完成后，所有网格都可以在 FreeCAD 图形界面中直观显示，也可以输出到文件。对于内置兼容性的求解器，用户还可以使用 FreeCAD 有限元分析工具来施加边界约束、载荷及其他模拟条件。

LDPM 多面体单元结构、四面体网格以及相应的面片数据（包括面片节点、法向量/切向分量、投影、面积等）将作为输出文件提供，可供不同的求解器读取和解析。

3.2 显式和隐式求解器

本文选取以下 LDPM 实现进行比较：通过 VUEL 子程序实现的 ABAQUS 显式求解器 [2], Project Chrono [58], JAX [59], 开放学术求解器（OAS） [60], CAST3M [61, 62],FEMultiPhys [63] 和 Julia LDPM [64, 65, 66, 50]。这些包含隐式和显式求解器的软件包中的 LDPM 实现，已在参考文献 [53] 中详细介绍。

隐式求解器均采用无条件稳定的时间积分格式，并根据多种收敛准则检查收敛情况，相关内容将在以下章节中概述，并在参考文献 [53] 中详细讨论。这使得很难为不同求解器设置时间步和收敛容差，从而确保比较有意义。

因此，我们决定允许不同的软件开发人员根据其经验以及对具体实现的了解来设置这些参数，唯一的要求是，所有模拟在大多数情况下都必须在迭代次数少于 50 次的条件下收敛。不过，如果这种情况只出现在少数步骤中，则允许迭代次数较多，也可以接受未收敛的结果。

值得注意的　是，显式求解器无需设置任何模拟级参数，因为它们
不基于任何
收敛准则，且时间步长由其稳定性条件决定。
Tabl表 1 报告了与所采用的求解器相关的基本信息。表 2 随后总结了隐式求解器及其与　平衡相关的牛顿-拉夫森迭代搜索设置。

3.2.1 AE:ABAQUS 显式求解器[3]

为简化模拟并与现有有限元和相互作用库集成，格子离散颗粒模型通过商业求解器 ABAQUS Unified FEA 中的“VUEL”用户单元子程序实现，该求解器采用基于中心差分算法的显式时间求解器 [2] [67]。导入后，可按照与 ABAQUS 原生网格相同的方式操作 LDPM 网格，包括施加边界条件、约束、相互作用及其他功能（例如质量缩放）。值得

[1] 主要联系人：Erol Lale, lale@itu.edu.tr 和 MatthewTroemner, mtroemner@gmail.com
[2] https://github.com/computational-mechanics-material-models/chrono-preprocessor
[3] 主要联系人：Erol Lale, lale@itu.edu.tr

一提的是，通过使用内置的 ABAQUS 子程序来控制底层 LDPM 计算，模拟可以实现完全并行化。因此，任何 LDPM 域都可以按照与有限元分析分解相同的方式进行分解。

3.2.2 CI：Project Chrono[4]

Chrono 是一款开源多物理引擎，旨在模拟复杂的大规模系统的动力学。它采用 C++ 编写，设计上具有模块化和可扩展性。Chrono 尤其适用于模拟涉及摩擦接触、多体动力学、流固耦合、颗粒动力学和有限元分析的系统。Chrono 可用于工程和科学领域的广泛应用 [58]，并以 BSD 风格许可证 [5] 公开提供。Chrono 的 LDPM 实现可在 chrono-concrete 分支 [6]中找到。

Chrono 实现了多种隐式和显式时间积分求解器，包括 2nd 阶隐式时间积分器，例如 Hilber-Hughes-Taylor (HHT) [68], Newmark 方法 [47] ，以及一阶隐式技术，例如线性化欧拉法和投影欧拉法 [58]。

海森矩阵分解与收敛准则：此处展示的数值算例使用 Chrono-V8 进行模拟，其中系统矩阵在每个时间步更新并因式分解一次（在第一次迭代时）；不过，始终使用初始弹性刚度。最近，Chrono 发布了较新的 V9 版本，该版本可选择仅在分析开始时更新并因式分解一次系统矩阵。Chrono V8 根据积分模式“加速度”或“位置”采用两组不同的收敛准则。如果残差足够小，或状态更新足够小，即判定为收敛。本文选择了位置模式，该模式使用加权均方根 (WRMS) 方法检查收敛性，如 $\|\Delta u\|_{WRMS} < 1$所示。对于 WRMS 检验，阈值始终设为 1，因为误差会通过按 $w_i = 1/(r_{\text{tol}}|u_i| + a_{\text{tol}})$计算的权重，依据用户定义的相对容差和绝对容差在内部进行归一化。这里， u_i 表示自由度（DoF，即位移和转动）， Δu_i表示其在迭代过程中的增量。本研究中的所有模拟均采用 HTT 方法，参数为 $\alpha = -0.05$ 、 $\gamma = 1/2 - \alpha$ 和 $\beta = 1/4(1-\alpha)^2$，相对容差和绝对容差分别为 $r_{\text{tol}} = 10^{-4}$ 和 $a_{\text{tol}} = 10^{-6}$。

3.2.3 CA：Cast3M[7]

Cast3M 是一款计算机程序，开发用于：（i）采用有限元法进行结构分析；（ii）利用计算流体力学分析流动。该程序最初由法国原子能委员会（CEA）系统与结构建模部开发。目前，Cast3M 是一款通用程序，可用于静力学和动力学（振动、特征值分析）中的线弹性问题、热学和传热问题、非线性问题（包括几何和材料非线性），以及接触问题等逐步动态问题。与许多其他程序不同，Cast3M 并非以黑箱方式运行，而是为用户提供一组可组合的算子，用以构建并求解复杂问题。该软件采用一种名为 Gibiane 的高级命令语言，允许用户将数据和结果作为对象进行操作。算子的编程语言为 ESOPE，可视为支持动态内存分配的高级 FORTRAN 77。Cast3M 是一个完整的系统，不仅集成了求解器，还包含前处理和后处理功能。

格子离散颗粒模型在 ESOPE 中实现。尽管 ESOPE 可通过平均加速度法，使用一致质量矩阵和集中式质量矩阵求解瞬态解，但本研究仅采用稳态（静力）求解器。

海森矩阵分解和收敛准则：Cast3M 使用的初始刚度在模拟开始时计算并仅因式分解一次。收敛准则要求残余力的 ℓ_2 范数与外力的 ℓ_2 范数之比低于阈值 10^{-4}。

[4] 主要联系人：ErolLale，lale@itu.edu.tr [5] https://github.com/projectchrono/chrono

[6] https://github.com/Computational-Mechanics-Material-Models/chrono-mechanics

[7] 主要联系人：Gilles Pijaudier-Cabot，gilles.pijaudier-cabot@univ-pau.fr

3.2.4 OA：Open AcademicSolver[8]

开放学术求解器（OAS）是一款开源软件，可在[9] GPLv3 许可证下公开获取。其核心采用 C++ 编写，并使用面向对象的代码结构。它最初是为稳态力学问题开发的求解器，主要侧重于离散介观材料表征。早期工作将材料属性中的随机场波动所描述的空间材料随机性与断裂 [48, 49]相结合。为实现离散化 [69, 70]的自适应细化，研究人员投入了大量工作。之后，代码经过修改，加入了显式和隐式瞬态求解器，以及多物理场任务 [60, 70]。OAS 的一项关键特性是能够递归嵌入子模型，从而可用于有限元分析[2] （或嵌套）均质化 [71, 72, 73]。该求解器包含标准有限元和晶格颗粒单元，例如 LDPM 四面体单元和 CSL 两节点边单元。

此处介绍的 OAS 模拟采用 Chung 和 Hulbert [74], 提出的隐式广义-α 方法。这是一种包含四个参数 α_m、 α_f、γ 和 β的通用方法。对于 $\alpha_m = 0$ ，可得到 HHT 方法 [68],；对于 $\alpha_f = 0$ ，则得到 WBZ 方法 [75], ；令 $\alpha_m = \alpha_f = 0$ ，即可得到 Newmark 方法 [47]。通过设置 $\alpha_m = \frac{2\rho_\infty - 1}{\rho_\infty + 1}$、 $\alpha_f = \frac{\rho_\infty}{\rho_\infty + 1}$、 $\gamma = \frac{1}{2} - \alpha_m + \alpha_f$和 $\beta = \left(\frac{1 - \alpha_m + \alpha_f}{2}\right)^2$，可获得最优表现（二阶精度、高频阻尼、低频无阻尼）。谱半径 ρ_∞设为 0.8。

海森矩阵分解和收敛准则：本文所有模拟中，OAS 均使用初始刚度，该刚度仅在模拟开始时计算并分解一次。收敛准则依据参考文献 [76, 第 332], 页确定，收敛阈值均为 10^{-4}。这些准则是：（i）残差的 ℓ_2 范数；（ii）自由度增量的 ℓ_2 范数，分别以外力、内力和惯性力范数的最大值或自由度总值的范数进行归一化。第三项收敛检查计算残余力在自由度增量上的能量，并以总外能、内能或动能进行归一化。

3.2.5 MP：*FEMultiPhys* 代码[10]

FEMultiPhys 是一款面向科研的通用有限元分析程序，用于模拟随时间变化的耦合问题，包括力学变形、热传递、多孔介质中的质量传输，以及多种物质的化学对流/扩散/反应。*FEMultiPhys* 主要适用于结构构件和系统级分析。该程序可免费使用，并可通过美国国家科学基金会的 *DesignSafe* 网络基础设施下载 [63]。

FEMultiPhys 中的 LDPM 实现主要基于文献 [1] 所述的原始 LDPM公式。*FEMultiPhys* 版本的唯一主要区别在于对角质量矩阵的获取过程。具体而言，质量矩阵的建立假定采用集中式（点）质量，并为每个颗粒采用各向同性（即对角）转动惯性张量。后一假设意味着，对于任意笛卡尔三轴，相应的对角转动质量均相同。首先将 LDPM 四面体视为连续体区域，计算每个颗粒的平动质量。每个四面体的总质量取为未变形体积与混凝土（常数）平均质量密度的乘积，然后将其等分给四个顶点粒子。随后，将颗粒视为直径等于颗粒直径的实心球，计算转动惯性张量中每个对角元素 I_m 的数值 d_p： $I_m = md_p^2/10$。这种方法可能具有一些优势，例如对于大转动计算而言，因为它得到的是对角各向同性转动质量矩阵。

LDPM 的计 算在每个步骤中均采用向量化处理；也就是说，每条单独的指令（例如，计算 ion 面片法向量的应 变）都会同时应用于一组面片。

本文介绍的模拟基于该代码的隐式动力求解器，并采用 HHT 时间推进格式 [68]。求解以增量迭代方式进行，迭代采用基于初始切线刚度矩阵的牛顿-拉夫森算法。当残差（不平衡力）向量的范数小于用户指定的容差时，即认为达到收敛。系统提供绝对数值和相对数值两种判据；本文采用后者。对于隐式求解中刚度矩阵的求逆（更准确地说是因式分解）及相关回代运算，代数计算采用并行直接稀疏求解器*PARDISO*，该求解器由英特尔 *oneAPIMath KernelLibrary* ([77])实现。

海森矩阵分解和收敛准则：此外，FEMultiPhys 使用初始弹性刚度，并仅在模拟开始时对其进行一次因式分解。评估收敛情况时，将

[8] 主要联系人：Ian Eli，ian.elias@vut.cz

[9] https://gitlab.com/kelidas/OAS

[10] 主要联系人：Ioannis Koutromanos, ikoutrom@vt.edu

ID	软件	求解器类型	算法	Mass
AE	ABAQUS	显式	中心差分	集中式
JA	JAX-LDPM	显式	中心差分	集中式
CI	Chrono	隐式	HHT	一致
OA	OAS	隐式	广义-α	一致
CA	CAST3M	隐式	静力	N/A
MP	FEMultiPhys	隐式	HHT	集中式
JU	Julia LDPM	隐式	静力、弧长	

表 1：所采用求解器的基本信息，更多信息请参见参考文献 [5 3].

残余力的范数除以内力的范数所得的值与阈值 10^{-3}进行比较。

3.2.6 JA：JAX-LDPM[11]

JAX-LDPM 是一款开源软件[12] ，由香港科技大学的研究人员积极开发。不同于使用 C/C++或 Fortran 等编译型语言开发的典型科学计算库，JAX-LDPM 是一个纯 Python 库，并通过即时编译技术加速。

JAX-LDPM 基于 JAX [78], ，后者是一个不断发展的 Python 库，用于通用高性能数值计算，专注于深度学习，由谷歌开发和维护。作为一种新型人工智能框架，JAX 凭借出色的灵活性和快速性能 [79]，旨在取代 TensorFlow，成为谷歌部分产品的新底层支撑。除在机器学习研究中取得显著成功外，JAX 还被证明是高性能科学计算任务的强大构建模块，包括计算流体力学 [80, 81], 、结构动力学 [82], 、有限元分析 [59], 、结构形状优化 [83], 等。根据硬件可用情况，同一段代码可自然地运行于 CPU 或 GPU 上。由于 JAX 本身是一个深度学习框架，JAX-LDPM 可以使用 JAX生态系统提供的所有最先进深度学习模型。JAX-LDPM 使用显式中心差分法进行时间积分 [67, 44]。本研究中的模拟采用集中质量矩阵，并在 GPU架构上执行。

3.2.7 JU：JuliaLDPM（JuLDPM）软件包[13]

Julia LDPM（JuLDPM）软件包由匹兹堡大学开发并维护，目前作为一款研究工具，用于模拟混凝土 [84],地质材料 [85], 和纤维增强聚合物中的力学与传输耦合现象 [86]。

LDPM 的实现遵循 Cusatis等人 [1]的原始工作，以此定义计算框架。该软件包完全使用 Julia编程语言编写。Julia 是一种为科学计算应用开发的动态语言 [87]。作者此前的工作详细介绍了该方法的原始实现 [88]。 [50]中介绍的最新进展使 LDPM控制方程能够采用静力求解器。虽然 LDPM运动学与原始公式保持一致，但对本构定律进行了若干局部修改，使晶格层级上的任意牵引力与应变度量组合所对应的材料响应均保持连续。不过，为了与本研究中使用的其他实现进行直接比较，所有 JAX-LDPM 模拟均采用本文前文所述的原始 LDP M 本构定律。

海森矩阵分解与收敛准则：切线刚度算子通过着色辅助压缩前向模式自动微分进行计算。此外，静力实现采用自适应弧长法，该方法已证明在测试的大多数加载条件下均可实现二次收敛 [50]。收敛准则采用残余力范数与外力范数之比 ℓ_2 ，容差设为 10^{-7} ，但在收敛缓慢的时间步中会逐渐降低，最低可达 10^{-4}。

[11] 主要联系人：TianjuXue, cetxue@ust.hk
[12] https://github.com/tianjuxue/jax-ldpm
[13] 主要联系人：Alessandro Fascetti，fascetti@pitt.edu

ID	海森矩阵	海森矩阵分解	收敛准则	收敛容差
CI	弹性	时间步开始	增量	10^{-4}
OA	弹性	模拟开始	残差、增量、能量	10^{-4}
CA	弹性	模拟开始	残差	10^{-4}
MP	弹性	模拟开始	残差	10^{-3}
JU	切线	每次迭代	残差	$10^{-7} - 10^{-4}$

表 2：隐式求解器中牛顿-拉夫森迭代策略的信息：刚度矩阵类型、其计算与因式分解的频率、收敛准则及阈值。

4 数值算例

通过模拟包含复杂受压行为和断裂行为的相同力学问题，对不同实现进行比较。所有测试均采用相同的材料，其筛分曲线由富勒曲线（指数为 0.4）定义，最大骨料粒径为 12 mm，水泥含量为 $c = 375\text{kg/m}^3$, ，水灰比为 $w/c = 0.5$。所有数值算例采用相同的材料参数，列于附录表 15。这些参数取自参考文献 [20] 中基于现有实验数据确定的数值。报告 [53] 介绍了在单个 LDPM 四面体上进行的验证模拟，其中施加了指定的运动学条件，以确保所有实现对单个 LDPM 四面体给出完全相同的响应。

各软件实现的结果比较如下。

• 通过绘制施加载荷的大小与位移的关系图，对整体响应 进行直观比较。对于部分测试，还绘制了根据载荷和位移计算得到的名义应力和名义应变。

• 每个时间步都会报告迭代次数，用于隐式求解器。显式求解器 AE 和 JA 不进行迭代，因此未纳入其中。

• 动能 W_{kin} 随时间的变化绘制成图。静力求解器 CA 和 JU 不提供动能，因此未纳入其中。

• 相对能量平衡按 $100 \times |(W_{\text{ext}} - W_{\text{int}} - W_{\text{kin}})/W_{\text{ext}}|$ 计算，并绘制其随时间的变化。 W_{ext} 和 W_{int} 分别表示内力和外力所做的总功。由于缺少动能，因此不使用这一特征比较稳态求解器 CA 和 JU。

• 通过计算 LDPM 四面体每个面片上的总裂纹张开量 $w = \sqrt{w_N^2 + w_M^2 + w_L^2}$，比较模拟结束时的裂纹模式；$w_\alpha$ 表示局部参考系中的裂纹张开标量，其中 $\alpha = N$ 为法向方向，只有正的非弹性应变才会产生裂纹张开量 w_N。随后，报告每对实现的 (i) 皮尔逊相关系数和 (ii) 归一化均方根误差（NRMSE）。NRMSE 的表达式为

$$\text{NRMSE}(a,b) = \frac{100}{\tilde{w}} \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left[w_i^{(a)} - w_i^{(b)} \right]^2} \tag{4}$$

其中，符号 a 和 b 指代进行比较的两种实现； n 是模拟中的面片数量，即 LDPM 四面体数量的 12 倍。$\tilde{w}$ 是归一化常数，取为 OA 模拟中的最大裂缝张开量 $\max_i w^{(OA)}$ ；加入常数 100 是为了使误差以百分比为单位表示。

目前尚无普遍接受的相关性或归一化均方根误差标准，用于判定数据集是否一致。本文任意划分并识别了四种不同的内部等级，并以逐渐加深的灰色色调表示：(i) 实际上完全相同——相关性 < 0.999，归一化均方根误差 $< 1\%$；(ii) 差异较小——相关性 < 0.9，归一化均方根误差 $< 5\%$；(iii) 差异较大——相关性 < 0.8，归一化均方根误差 $< 10\,\%$；以及 (iv) 差异很大。

• 通过测量实际计算时间来评估各实现的性能。所有隐式求解器均在同一处理器 Intel(R) Xeon(R) Gold 6230 上运行，并使用单个计算线程。单线程模拟至少能够对各实现的计算性能进行一些基本比较

频率 #	AE	JA	CI	OA	MP
1	1404.79	1404.79	1404.23	1403.09	1381.19
2	3009.09	3009.09	3009.54	3008.41	2928.21
3	5399.68	5399.45	5234.04	5223.81	5069.29
4	5435.92	5435.70	5265.85	5255.62	5105.63
5	8991.48	8991.14	8281.07	8236.76	-

表 3：按升序排列的自由振动测试前五个频率 [Hz]及峰值振幅 r.

	AE	JA	CI	OA	MP
时间步长 [s]	10^{-7}	10^{-7}	2×10^{-5}	2×10^{-5}	2×10^{-5}
时间 [h]	2.5	0.97	2.8	0.45	0.5

表4：自由振动测试的时间步长和总计算时间。

。不过，大多数软件都支持对过程进行并行化，从而大幅缩短计算时间。两个显式求解器可以使用更多计算线程，因为并行化是它们与生俱来且不可或缺的特性。AE 与隐式求解器在同一处理器上运行，使用 24 个计算线程。其运行时间几乎随计算线程数线性变化 [89]，因此，将其运行时间乘以 12 至 24 之间的系数，即可与隐式求解器进行一些基本比较。另一个显式代码 JA 专为图形处理器设计，因此运行于 NVIDIA Quadro RTX 8000 上，并充分利用其全部性能。因此，其报告的运行时间无法与其他实现直接比较。

4.1 线弹性状态下的自由振动

第一个基准测试模拟了弹性棱柱体试样（$D = B = 100\,\mathrm{mm}$， $H = 200\mathrm{mm}$）的自由振动。根据图2a，在试样顶部端部的一个角节点处施加力 P。底部节点的所有自由度（包括转动）均受到约束，而顶部节点可自由移动。通过在极短时间内将力的数值从 0 线性增至 50 N，以突然加载的方式施加该力；该时间为 0.01 s。随后，在另外 0.00004 s 内线性卸载。之后，允许试样自由振动，总时长为 0.1 sec。该力学问题总计约有 15 200 个自由度。在此基准测试中，采用线弹性 LDPM本构方程，其弹性参数 E_0 和 α 依据表15确定。显然，此基准测试未采用稳态（静力）求解器。

图3b报告了通过快速傅里叶变换（FFT）得到的系统主要固有频率。前几个频率也列于表3中。图2c显示了 x位移随时间的变化。第一固有频率 ≈1400Hz对应于正、负位移值之间明显的大幅振荡。图2c中振幅随时间整体减小，并非由阻尼造成，而是由另一种低频振荡引起；由于时间序列过短，FFT无法捕捉到这种振荡。

总体而言，所有求解器给出的响应几乎完全相同，具体的时间积分方法和实现方式几乎没有影响。观察到的细微差异源于质量矩阵的表示方式。采用一致质量矩阵的隐式求解器CI和OA给出的结果非常相似。这些数值与采用集中质量矩阵的显式求解器（AE和JA）所得结果略有不同，后者还存在众所周知的数值频散问题 [90]。MP隐式求解器计算得到的频率数值与其他求解器不同，但差异仅为几个百分点，这是由于计算LDPM单元转动惯量时采用了近似方法；参见第3.2.5节。

表4列出了不同求解器使用的时间步：显式求解器为 $10^{-7}\,\mathrm{s}$，隐式求解器为 $2 \times 10^{-5}\,\mathrm{s}$，以及以小时计的总计算时间。显式求解器是条件稳定的，模拟采用的时间步约为通过对单个四面体 [1, 76]进行特征值分析所估算的临界时间步长的 90%。对于此次模拟，由于系统是线性的且无需迭代，隐式求解器的表现优于显式求解器。即使显式计算采用多个计算线程，这一点仍然成立。通过内置并行化，还可以进一步提高隐式求解器的速度。

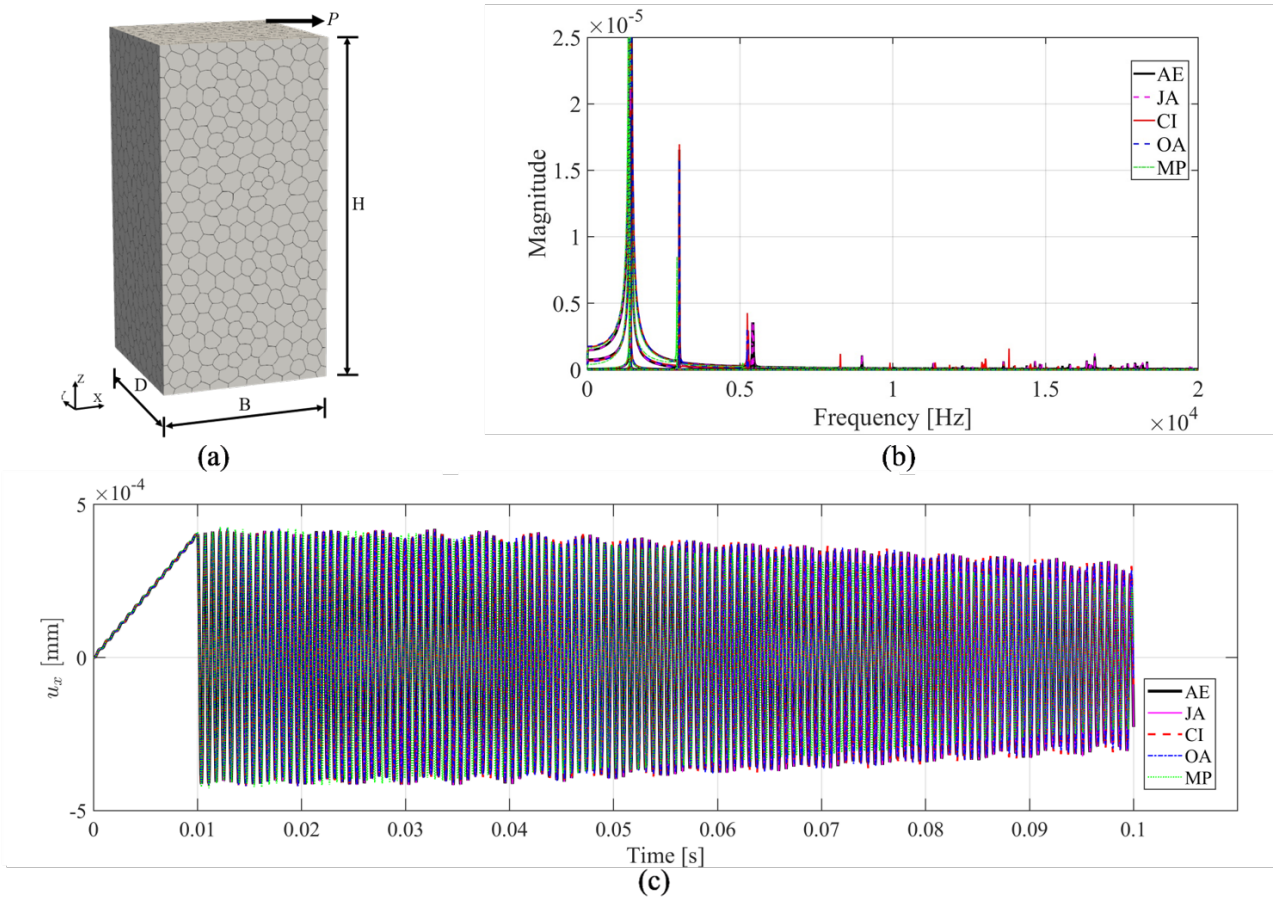

图2：（a）试样尺寸；（b）响应的FFT；（c）角节点随时间的平移 u_x 。

4.2 单轴应变压缩试验中的硬化行为

下一项模拟试验是单轴应变试验。图3a所示的圆柱形试样（$D = 100\text{mm}$， $H = 200\text{mm}$）通过对位于试样顶部端部的所有节点施加 $\dot{u}_z = -5\text{mm/s}$ 的速度进行压缩。试件底部的所有节点在 z 方向上受到约束。此外，试样顶部和底部端部的转动 θ_x 和 θ_y 也受到限制。最后，通过约束表面节点在 x 和 y 方向上的运动来防止侧向膨胀。加载速度实际上并非常数，而是在最初的 0.001 s 内从零线性增加到 -5mm/s，以减少加载过程中的突变。该力学问题约有 10 900 个自由度。

图3b给出了计算得到的名义（宏观）应力（载荷力除以面积， $-4P/\pi D^2$）与施加的名义（宏观）应变（顶部位移除以长度， $-u_z/H$）之间的关系。所有不同的实现均给出了几乎完全相同的响应，呈现出应变硬化特征。图3c给出了隐式求解器的迭代次数，该次数相对稳定，只有一次事件例外：OA 求解器在该事件中需要异常多的迭代。报告的动能（图3d）和能量平衡误差（图3e）证实，所有模拟均稳定且接近稳态（终态内能为25 kJ）。CA和JU求解器进行的稳态模拟也证实了这一点，其结果与瞬态响应无法区分。MP求解器的能量误差最大，动能振荡也最剧烈，这可归因于质量矩阵中某些项采用了近似形式。最后，图3f显示了由CI 求解器计算的终态步中四面体LDPM单元的体积应变分布。值得注意的是，由于LDPM具有捕捉材料非均质性影响的内在能力，即使材料处于宏观均匀状态，体积应变在空间上仍表现出较大的变化。

裂缝张开相反，体积

情况未针对这一设置进行分析，因为它们并非模型最重要的输出。模拟结束时计算出的体积应变进行了比较。皮尔逊相关系数

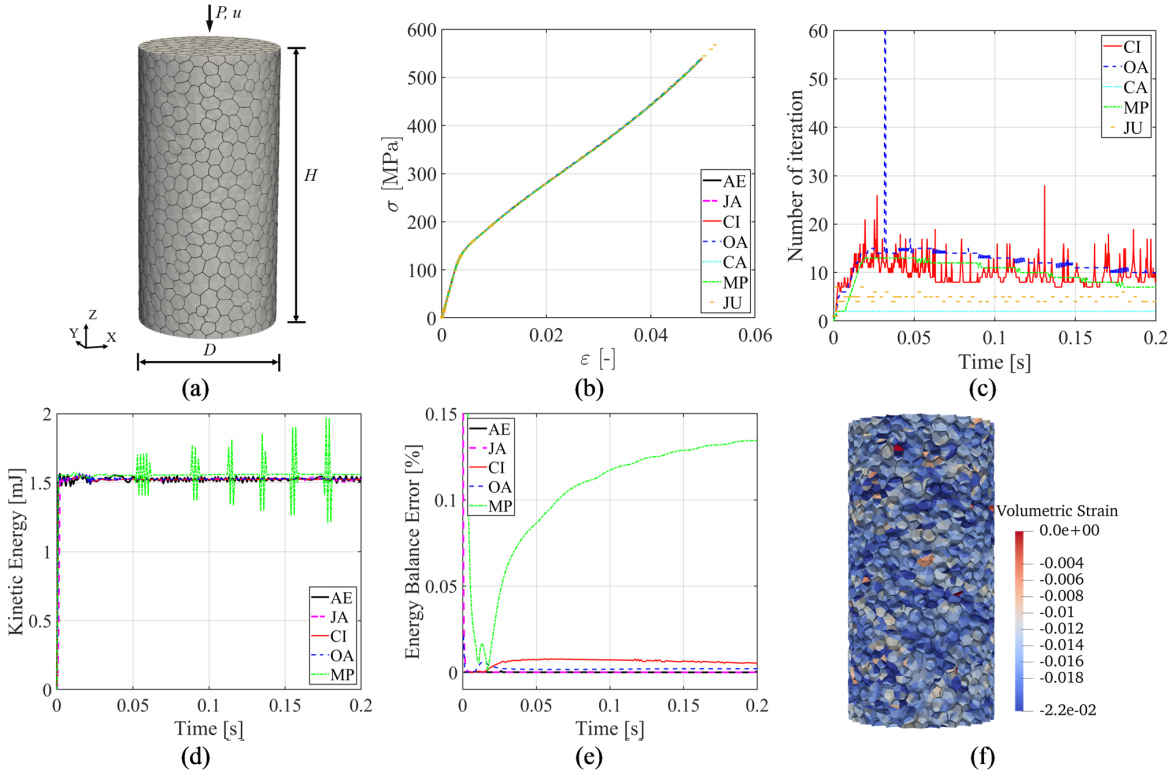

图3：单轴应变试验：(a) 试样尺寸；(b) 竖直方向的名义应力-应变响应；(c) 隐式求解器的迭代次数；(d) 动能；(e) 能量平衡的误差百分比；(f) 最后一个时间步的体积应变标量分布。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA	JU
AE		0.050	0.139	2.014	1.157	0.187	1.479
JA	1.000		0.142	2.009	1.159	0.178	1.510
CI	1.000	1.000		2.013	1.169	0.104	1.454
OA	0.935	0.935	0.935		2.376	2.025	2.423
MP	0.979	0.979	0.979	0.910		1.173	1.945
CA	0.999	0.999	1.000	0.934	0.979		1.502
JU	0.985	0.985	0.986	0.934	0.960	0.986	

表5：单轴应变模拟结束时（$t = 0.2$s）体积应变的相关性（下三角）和归一化均方根误差（上三角）。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA	JU
时间步长 [s]	10^{-7}	10^{-7}	10^{-4}	5×10^{-4}	2×10^{-5}	10^{-4}	-
时间 [h]	2.2	1.6	1.9	0.25	0.22	8.3	6.6

表6：单轴应变试验的时间步长和总计算时间。

每对模拟的体积应变相关系数和归一化均方根误差见表5。求解器 AE、JA、CI 和 CA 得出的结果几乎完全一致，因为相关性为 1，且归一化均方根误差低于 0.2%。OA、MP 和 JU 的结果略有偏差，但差异仍然很小。

表6列出了时间步长和计算时间。由于此硬化示例相对简单，迭代次数较少，因此隐式求解器通常更具优势，尽管它们都仅在单个计算线程上运行，因为它们可以采用大得多的时间步。CA 和 JU 速度较慢，很可能是因为它们在每个时间步更新并分解刚度矩阵（CA，弹性

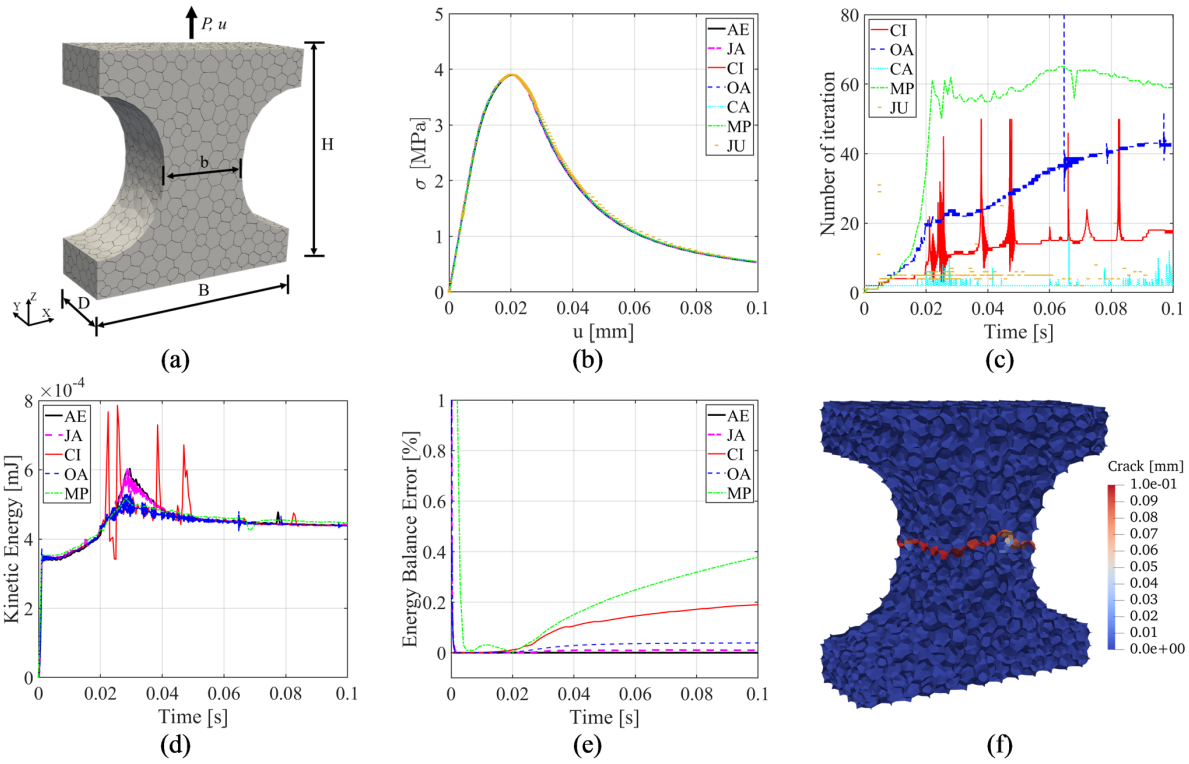

图4：哑铃形试样试验：(a) 试样尺寸；(b) 竖直方向的应力-位移响应；(c) 隐式求解器的迭代次数；(d) 动能；(e) 能量平衡的误差百分比；(f) 最后一个时间步的裂纹模式。

矩阵），或在每次迭代时更新并分解（JU，切线矩阵）。然而，额外的工作并未带来实际的加速，因为即使使用弹性刚度矩阵，该问题似乎也能快速收敛。

4.3 哑铃形试样拉伸试验中的断裂行为

第三个基准测试采用哑铃形试样进行拉伸加载。试样如图4a所示，尺寸为 $B = H = 150$mm、 $b = D = 50$ mm。所有下表面节点的平移和转动 θ_x 及 θ_y 均受到约束；上表面节点也采用相同约束，但规定其垂直速度为 $\dot{u}_z = 1$mm/s。与单轴压缩测试类似，速度在最初的0.001 s内从零线性增加。测量加载力 P。该模拟约有6 600个自由度。

所得应力-位移数据见图 4b，应力对应于最小的中央横截面， $\sigma = P/bD$。所有实现的响应几乎无法区分，包括静力求解器。图 4c 给出了隐式求解器每个时间步长的迭代次数，同样，OA 求解器有一个步未能收敛。JU 求解器预测的力略高于其他求解器，但由于收敛问题，计算未能完成，并在 0.06 s 时停止。图 4d 和图 4e 分别显示了动能和能量误差。动能相对较小（终态步的内能约为 500 mJ），且能量误差未呈现任何不稳定行为。图 4f 显示了模拟结束时的裂纹模式（通过 CI），颜色表示计算得到的总裂纹张开量 w。该响应的特征是试样中仅发展出一处局部化断裂。

表7展示了通过相关性和归一化均方根误差对最终裂纹形态进行的比较。除CA外，结果表明所有求解器之间的吻合度都非常高。表8列出了各个实现的时间步长和总计算时间。这次MP求解器速度最快，超过了使用多个计算线程的显式求解器。MP的快速计算很可能得益于采用了最大的时间步长和最宽松的收敛容差；另一方面，每个时间步通常约需迭代60次，不符合将迭代次数控制在50次以下的要求。其他隐式求解器在几小时内得出了结果；考虑到仅使用了一个计算线程，这仍是合理的耗时。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA	JU
AE		0.258	0.467	0.479	0.436	7.778	0.533
JA	1.000		0.360	0.404	0.278	7.774	0.399
CI	0.999	1.000		0.249	0.341	7.764	0.109
OA	0.999	1.000	1.000		0.433	7.767	0.310
MP	0.999	1.000	1.000	0.999		7.729	0.345
CA	0.859	0.860	0.860	0.860	0.861		7.767
JU	0.999	1.000	1.000	1.000	1.000	0.860	

表 7：狗骨形模拟结束时（$t = 0.1$s）裂缝开口的相关性（下三角）和 NRMSE（上三角）。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA	JU
时间步长 [s]	10^{-7}	10^{-7}	2×10^{-5}	2.5×10^{-5}	5×10^{-4}	10^{-4}	-
时间 [h]	1.33	0.43	3.9	3.2	0.14	1.1	11

表 8：狗骨形拉伸试验的时间步长和总计算时间。

	AE	JA	CI	OA	MP
AE		3.428	3.467	2.958	3.000
JA	0.944		0.442	1.752	1.758
CI	0.944	0.999		1.828	1.786
OA	0.958	0.985	0.984		0.355
MP	0.958	0.986	0.985	1.000	

表9：三点弯曲模拟结束时（$t = 0.1$s）裂纹张开量的相关性（下三角）和归一化均方根误差（上三角）。

4.4 三点弯曲试验中的断裂

对带中央缺口的经典三点弯曲试验进行了模拟。试样示意图见图 5a，尺寸为 $L = 1151\,\text{mm}$、$D = 200\,\text{mm}$、$B = 100\,\text{mm}$，缺口深度为 $a = 100\text{mm}$（D 的 50 %），缺口宽度为 4 mm。为缩短计算时间，仅将宽度为 $w = 100\text{mm}$ 的中央部分表示为中尺度离散模型，其余材料则采用连续均质线弹性模型（三线性四面体有限元）进行建模，弹性模量为 39 GPa，泊松比为 0.2，密度为 2380 kg/m^3。压板视为密度为 7800 kg/m^3 的刚体。连续部分与离散部分之间通过线性约束连接，边界粒子平移由相邻四面体单元的形函数决定。不同软件以不同方式实现这种依赖关系，采用的方法包括直接消去自由度或使用拉格朗日乘子。边界条件约束混凝土部分中央（y 方向）底部（z 方向）最左和最右（x 方向）节点的 u_z 和 u_y 运动，以及顶部中央节点的两个水平方向运动。顶部中央节点的竖向位移设定为速度 -15mm/s，并以 0.002 s 的初始线性增速期开始。自由度数量约为 27 000。

加载力和裂纹口张开位移（CMOD）见图5b。这一次，曲线存在明显差异，尽管响应的整体特征相同。这些差异归因于连续域与离散域之间连接方式的不同，因为在模拟的早期阶段就已显现。隐式求解器的迭代次数见图5c，动能和能量平衡误差分别见图5c和图5d。大多数隐式求解器的收敛性较差，且多次接受了未收敛解。CA求解器甚至在峰值力后不久便因迭代发散而终止。由于JU求解器过早失去收敛性，因此未报告其结果。此外，可以看到CI、JA和MP的能量平衡误差相对较大。MP的动能也明显更高，这可能归因于其采用了不同的质量矩阵处理方式。尽管如此，计算力的差异相对较小。

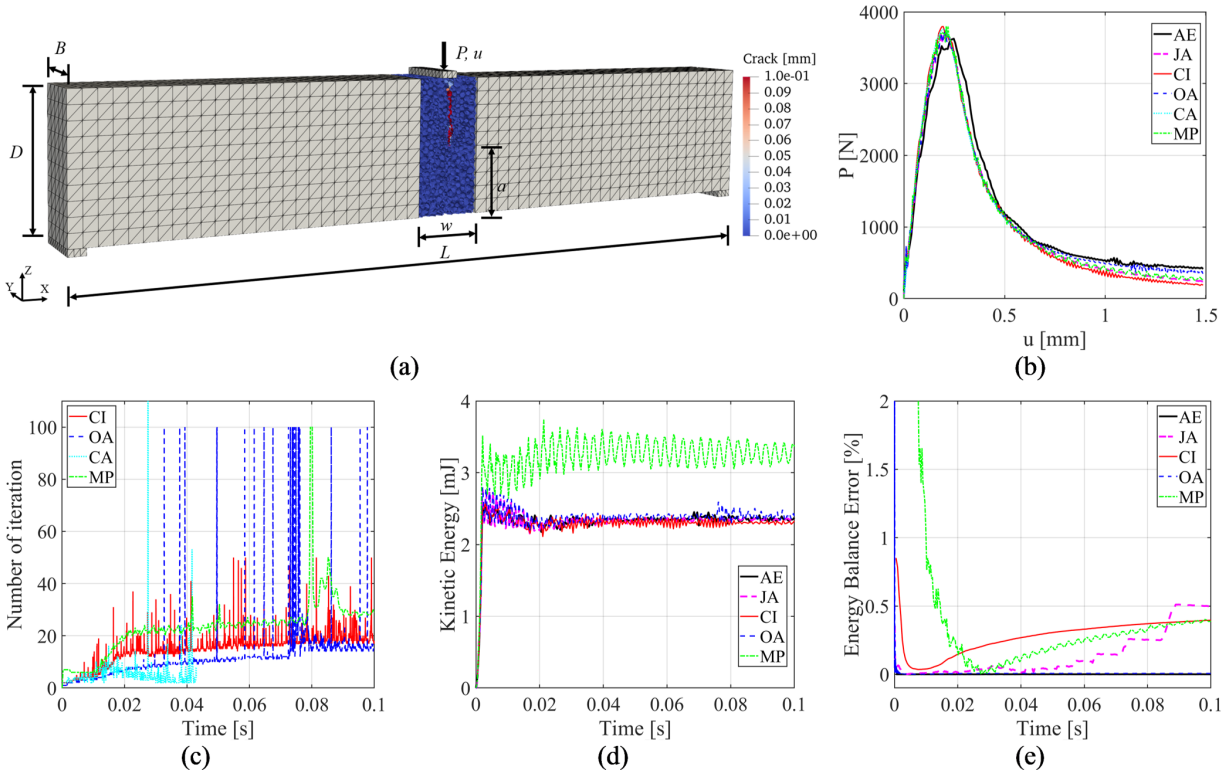

图5：三点弯曲试验：(a) 试样尺寸及最后一个时间步的裂纹模式；(b) 载荷-位移响应；(c) 隐式求解器的迭代次数；(d) 动能；(e) 能量平衡的百分比误差。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA
时间步长 [秒]	10^{-7}	10^{-7}	10^{-5}	2×10^{-6}	2×10^{-5}	10^{-4}
时间 [小时]	3.7	1.27	24.5	20.8	5.0	1.6⋆

表10：带缺口三点弯曲试验的时间步长和总计算时间。符号 ⋆ 表示模拟在加载时间达到 0.43 秒时终止，尚未到达最后一个时间步。

与载荷力令人意外的变化不同，裂纹形态的对比仅显示出轻微差异。表9中各对比组合的裂纹张开量NRMSE大多约为2–3%，相关性仍接近1。通过目视比较裂纹可知，差异主要出现在加载压板正下方区域。一些求解器预测最终裂纹向压板左侧扩展（AE、OA、MP），另一些则显示压板两侧均出现开裂（CI、JA）。请注意，OA–MP和CI–JA两组预测的裂纹实际上完全相同。AE求解器预测的裂纹差异最大，加载力也最为不同。

表 10 给出了该基准测试的时间步数和计算时间，结果的离散程度相当大。CI 和 OA 耗时最长，部分原因是时间步长较小，部分原因是收敛准则严格10^{-4}。CA 的时间不可比较，因为它未能完成整个模拟。采用最宽松收敛阈值的 MP 再次报告了所有隐式求解器中最快的结果。显式求解器表现良好，这也是首次可以认为它们优于大多数隐式求解器。

4.5 广泛断裂条件下的无围压压缩试验

本节模拟了图6a所示棱柱形试样的无侧限压缩试验，$B = D$ =100 mm，H = 200mm。试样顶部和底部表面与加载压板之间的摩擦力会显著影响其力学响应以及空间裂纹分布 [20]。为考虑不同的典型情况，本文研究了两种极端情形。第一种情形假设

摩擦力足够大，能够完全消除顶部和底部表面的水平运动。这种高摩擦情形下文称为固定。第二种极端情形下，摩擦可忽略，顶部和底部表面的节点可自由水平运动。本文将这种情形称为自由 。

在固定情况下，底部表面上的所有节点的所有位移和转动均受到约束。顶部表面也采用相同的约束，但会施加垂直速度 $\dot{u}_z = -5\text{mm/s}$（经过持续时间为 0.002 s 的初始线性斜坡后）。在自由情况下，其他条件相同，但两个表面上的水平位移 u_x 和 u_y 以及转动 θ_z 均不受约束。此外，顶部和底部表面上的中心节点的两个水平位移以及转动 θ_z 均受到约束。这两种情形的模型均约有 14 000 个自由度。

固定情况下的模拟结果见图 6。应变达到约 0.004 之前，各种实现的应力-应变响应几乎完全一致。峰值之后，在曲线下降段，不同响应曲线之间的一致性有所降低。在此阶段，响应的特点是动能出现尖峰（图 6）；这些尖峰与材料碎片从试样表面动态脱落有关，尤其发生在垂直边缘处。无论施加加载板位移的速率如何，实验中也能观察到这种峰后动态现象。发生这些动态事件时，即使迭代次数较多（> 100），隐式求解器偶尔也无法收敛。不过，在材料破坏和材料非线性行为导致动能尖峰消散后，求解会在后续步骤中重新收敛。显式求解器 AE 和 JA 以及稳态求解器 CA 的结果与其他实现存在偏差。采用不同求解参数重复运行，得到的偏差始终相同。JU 实现因失去收敛性而提前终止。

图 7 展示了自由情况下得到的结果。在宏观应变约为 3.5×10^{-3}（时间 0.14 s）之前，所有求解器的结果完全一致。正如 $t < 0.1\text{s}$ 时的动能几乎可以忽略不计所示（图 7），直至达到最大荷载，响应基本上是准静态的。峰值荷载之后，随着变形增加，宏观应力最初逐渐下降。在这一阶段，与前文讨论的“固定”情况类似，响应开始呈现动态演化，且隐式求解器有时会出现不收敛的情况。

经过最初的软化阶段后，响应表现为多处断裂的骤然动态演化，并伴随着宏观承载能力的突然丧失（图 7b）。此时，试样发生了广泛碎裂，碎片以较高动能剥落。系统的总动能显著增加（ $t >0.14$ s 时见图 6）。所有隐式求解器在大量步骤中均未能收敛，因此解的精度必然受到影响。此外，在这一模拟阶段，显式 AE 和 JA 求解器给出的结果也相当不同。这意味着，从时间$\approx 0.14\text{s}$ 起，所有受测求解器均无法给出可靠结果。

对于固定情况和自由情况，所得裂纹形态分别见图 6f 和图 7f。两幅图均处于 CI 实现的最后一步。正如预期，两种情况下裂纹模式均以贯穿性的方式出现。此外，在固定情况下，由于横向约束，顶部和底部边界处不存在裂纹。相关性和归一化均方根误差的成对比较见表 11 和表 12。两张表均基于修改后的数据计算，其中最大裂缝张开量被限制为 4 mm。这样做是为了消除脱落碎片对裂纹模式比较的影响。在自由和固定两种情形下，各实现之间均存在较大差异。唯一相似之处出现在固定情况下的 CI、OA 和 MP 求解器之间；这些求解器在固定情况下也给出了相同的应力响应。对裂纹进行目视比较可以发现，即使其相关性和归一化均方根误差显示出相反结论，裂纹仍然相当相似。试样整个体积中大量断裂面片的存在，使较小差异不断累积，最终导致整体特征出现较大差异。需要注意的是，对于通常被认为稳健且可靠的显式求解器组合 AE–JA，也可以观察到较大差异。

此外，还对自由情况在 0.12 秒时（即试样突然破裂之前）的裂纹进行了比较。表 13 显示，除 CA 实现外，各项差异都相当小。

时间步和计算时间见表 14。使用单线程的隐式求解器模拟时间通常长达数十小时，尤其是在自由情况下。显式求解器利用多个计算线程，在这些模拟中通常更快。

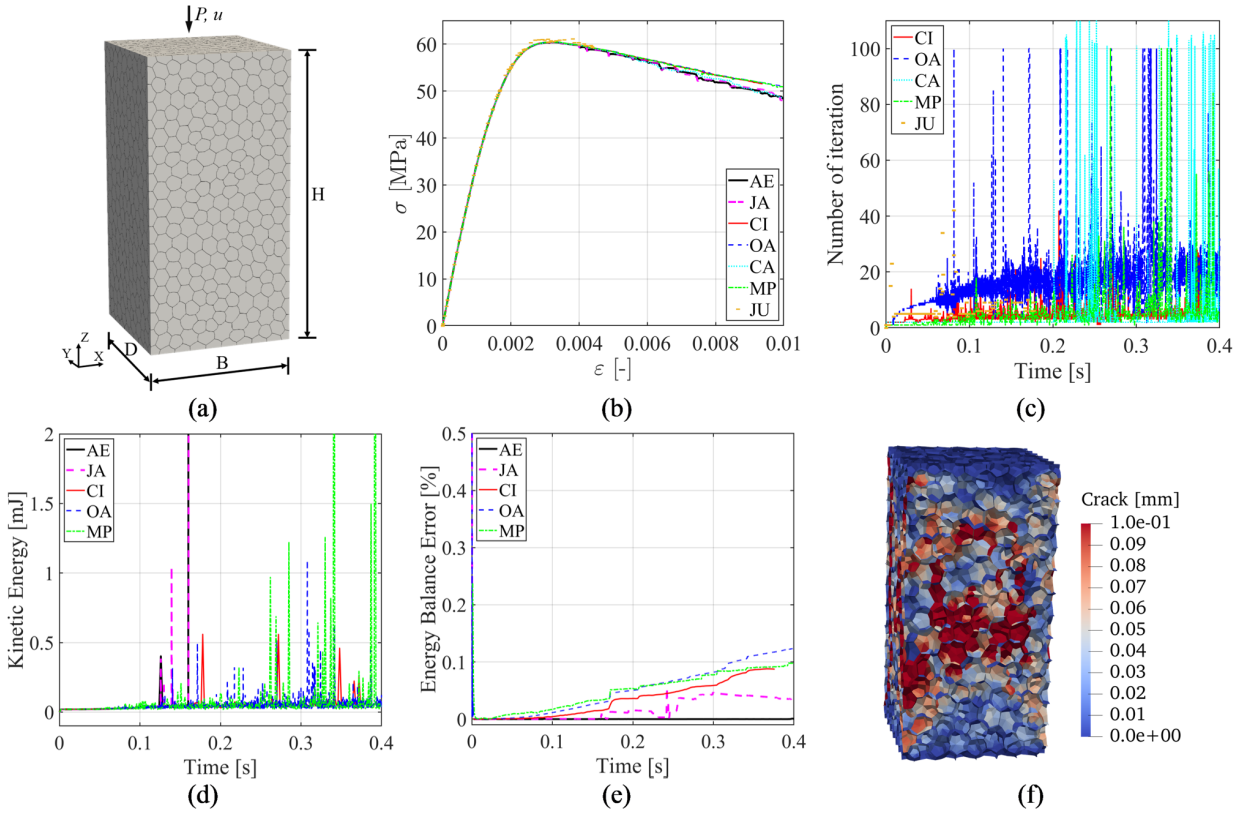

图 6：固定无侧限压缩试验：(a) 试样尺寸；(b) 竖直方向的应力-应变响应；(c) 隐式求解器的迭代次数；(d) 动能；(e) 能量平衡的误差百分比；(f) 最后一个时间步的裂纹模式。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA
AE		7.668	9.056	9.193	8.922	9.728
JA	0.828		11.540	11.681	11.453	10.866
CI	0.628	0.547		0.793	1.569	7.624
OA	0.615	0.534	0.993		1.627	7.817
MP	0.648	0.565	0.972	0.968		7.853
CA	0.601	0.612	0.668	0.652	0.653	

表11：高摩擦（固定）无侧限压缩模拟结束时（$t = 0.4$s）裂缝开口的相关性（下三角）和归一化均方根误差（上三角）。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA
AE		13.458	8.332	6.081	8.315	14.023
JA	0.683		12.496	13.615	15.160	15.745
CI	0.798	0.784		6.327	9.918	15.314
OA	0.898	0.686	0.847		8.257	14.329
MP	0.820	0.577	0.719	0.817		15.081
CA	0.710	0.624	0.671	0.720	0.631	

表12：低摩擦（自由）条件下无侧限压缩模拟结束时（$t = 0.2$s）裂缝开口的相关性（下三角）和归一化均方根误差（上三角）。

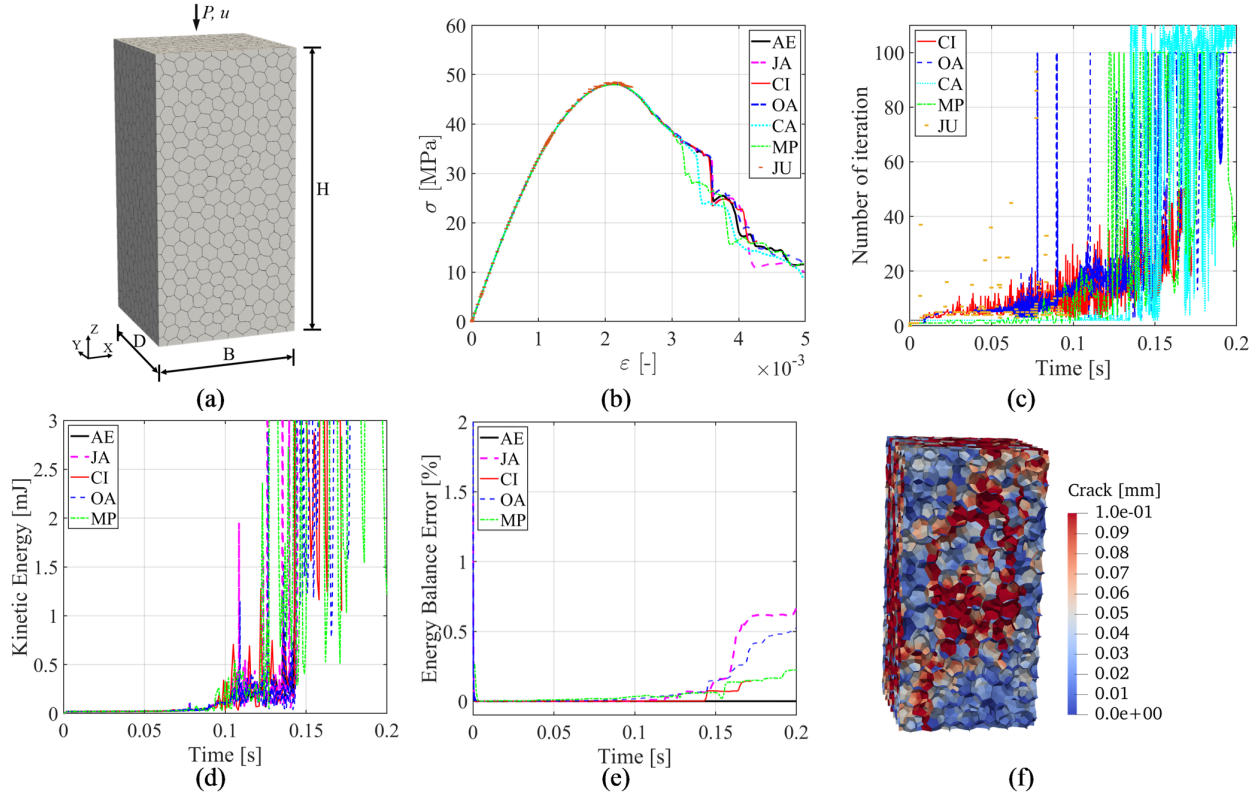

图 7：自由无侧限压缩试验：(a) 试样尺寸；(b) 竖直方向的应力-应变响应；(c) 隐式求解器的迭代次数；(d) 动能；(e) 能量平衡的误差百分比；(f) 最后一个时间步的裂纹模式。

	AE	JA	CI	OA	MP	CA
AE		0.054	4.828	4.769	4.473	10.087
JA	1.000		4.833	4.774	4.480	10.090
CI	0.938	0.938		1.266	4.622	8.422
OA	0.936	0.936	0.995		4.554	8.548
MP	0.946	0.946	0.930	0.931		8.748
CA	0.750	0.750	0.800	0.798	0.771	

表 13：低摩擦（自由）无侧限压缩模拟中，时间 $t = 0.12$s 时裂缝开口的相关性（下三角）和归一化均方根误差（上三角）。

		AE	JA	CI	OA	MP	CA	JU
固定	时间步长 [s]	10^{-7}	10^{-7}	5×10^{-6}	4×10^{-5}	10^{-5}	10^{-4}	-
	时间 [h]	4	5.3	62	4.6	7.5	18.5	5.4⋆
free	时间步长 [s]	10^{-7}	10^{-7}	5×10^{-6}	2×10^{-5}	10^{-5}	10^{-4}	-
	时间 [小时]	3.5	2.7	78.5	61	50	9.9	6.2⋆

表14：高摩擦和低摩擦条件下无侧限压缩试验的时间步长和总计算时间。符号 ⋆表示模拟因收敛问题而在加载结束前终止，发生时间分别为 0.18 s（固定）和 0.1 s（自由）。

5 数值 关于时间步长、收敛准则和稳定性的数值研究 y

如上一节所示，最具挑战性的模拟是无摩擦（自由）条件下的无侧限压缩试验。这是由于在峰值荷载之前，材料会从准静态行为过渡到一种动态

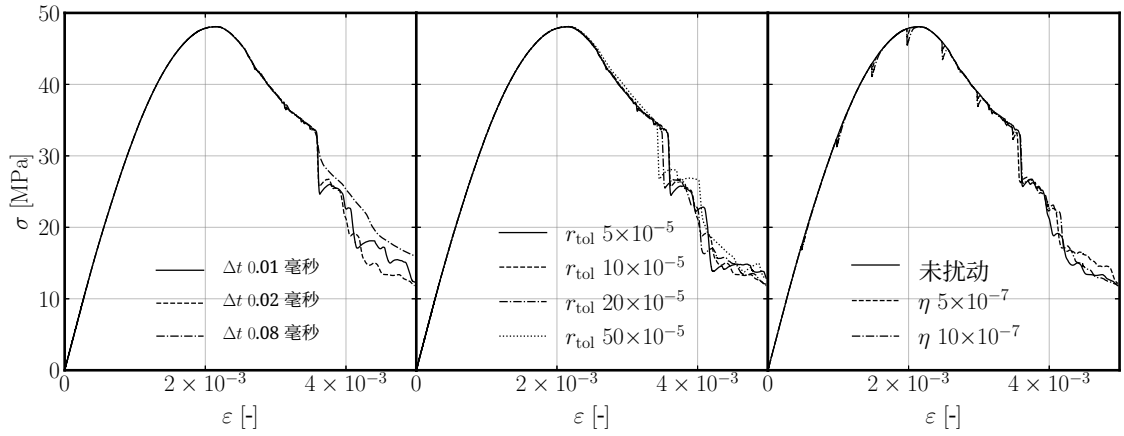

图 8：无摩擦无侧限压缩试验的响应对时间步长、收敛容差和随机扰动的敏感性。

响应，并在峰后阶段发生断裂局部化和碎裂。

为详细分析此情况，使用 OA 求解器进行模拟，分别采用（i）不同的时间步长，（ii）不同的收敛容差，以及（iii）定期向解中加入随机扰动。图 8 展示了这些模拟的结果。每隔 0.002 s，将一个取值范围从 $-\eta/2$ 到 $\eta/2$ 的均匀分布随机向量加到所有节点的自由位移和转动上，以引入扰动。其余求解器参数始终与上一节所用参数相同，即时间步长和收敛容差分别为 2×10^{-5}s 和 10^{-4}。

在响应的第一阶段（应变达到 3.5×10^{-3}之前），对时间步长的敏感性可以忽略。动态裂纹发展后的第二阶段则变得非常敏感，尤其是较大的时间步长会产生截然不同的响应，因为模拟几乎始终无法达到所需的收敛限值（无论误差如何，迭代 100 次后都会接受步骤）。第二项研究表明，参考收敛容差 10^{-4} 已足够，因为其结果与容差5×10^{-5}所得结果实际上完全相同。然而，放宽两倍或五倍的容差会导致一些偏差，起初出现在第二阶段，随后也出现在动态裂纹发展之前的初始阶段。收敛准则 5×10^{-4} 显然不足以得出可靠结果。

最后，扰动研究表明，即使是这种具有大量潜在裂纹路径和失效模式的复杂模拟，也表现出令人惊讶的稳定性。所测试的两个 η 数值都只会导致响应发生局部变化；模拟会迅速恢复到其稳定模式。差异仅出现在动态事件之后的第二阶段，该阶段的收敛性较差。

6 结论

本文系统比较了七种相互独立的格子离散颗粒模型（LDPM）实现，涵盖显式和隐式时间积分策略、瞬态和静力求解器，以及基于 CPU 和 GPU 架构的实现。这些实现由多个研究团队独立开发，并在一组统一的基准问题上进行测试，问题的力学和数值复杂性逐步增加，范围从线弹性振动到拉伸和压缩下高度非线性、断裂主导的响应。结果从独特的社区整体视角，展现了 LDPM公式的稳健性，以及与数值求解相关的实际挑战。

除运行于 GPU架构上的 JAX-LDPM 外，其他所有实现均运行于 CPU 架构，并支持使用单线程或多线程。三种实现（OAS、Project Chrono 和 CAST3M）采用开源方式；一种实现（FEMultiPhys）作为免费软件提供；还有一种实现则通过用户子程序用于广泛使用的商业软件 ABAQUS。

本研究的首要重要贡献，是揭示了开源或免费软件实现以及公开发布的基准数据所发挥的关键作用。多个开放或可免费获取的 LDPM 求解器，以及完整的输入文件和参考结果，使不同平台和数值策略之间得以开展透明的交叉验证。这种开放性不仅对于识别求解器特定优势和局限性至关重要，也有助于将时间积分、收敛

准则和实现细节方面的问题，与底层本构模型本身的问题区分开来。除本次比较外，本文提供的基准测试套件和数据集还建立了一个通用的参考框架，可为未来的 LDPM 发展提供支持，促进可复现性，并降低新研究人员进入该领域的门槛。

本研究的第二项重要成果是认识到，为比较不同 LDPM 实现而定义客观且具有普遍意义的标准，本质上十分困难；由于 LDPM 能够捕捉材料非均质性，因而会产生局部非均匀响应，这使得比较难度超过通常的非线性有限元模型。宏观应力–应变曲线、能量平衡和计算时间等整体量可提供有用的高层次指标，但在存在材料非均质性、应变软化和局部化时，往往不足以全面表征求解器的行为。即使整体响应几乎相同，裂纹张开量和断裂模式等局部场也可能存在显著差异，而这些差异取决于求解器选项、收敛容差、质量矩阵形式和数值阻尼。反过来，定量裂纹比较指标（如相关系数和归一化均方根误差）可能会放大普遍开裂模拟中的微小局部差异，使物理上相似的断裂模式在数值上显得不同。这些观察表明，对离散介观模型的求解器进行比较，不能依赖单一指标，而应采用多方面的评估方法，综合考量整体响应、局部场、稳定性和敏感性分析。

此外，结果凸显了模拟具有多个相互作用裂纹和碎裂特征的非线性行为时所涉及的根本性数值复杂性，尤其是在无侧限压缩过程中。在这些情况下，力学响应会从准静态转变为强动力学状态，并伴随能量突然释放、求解器失去收敛性，以及对数值参数和求解器级参数高度敏感。在这种条件下，隐式求解器存在局限性；尽管采用了复杂的算法，仍难以收敛。另一方面，显式求解器不会失去收敛性，而且在本文展示的大多数示例中，即使按所用线程数调整计算时间，其性能也优于隐式求解器。

然而，在模拟具有实际加载速率和实际加载持续时间的情形时，显式求解器的优势可能不复存在。例如，混凝土实验室常规进行的典型准静态混凝土试验，其加载速率比本文展示的无侧限压缩示例低 4 个数量级（$10^{-6}\mathrm{sec}^{-1}$ 与 $10^{-2}\,\mathrm{sec}^{-1}$相比），因此，实际试验持续时间为数分钟，而非不足一秒。如此不同的加载速率并不会导致系统动力学出现显著差异，因为如本研究所示，即使在 $10^{-2}\ \mathrm{sec}^{-1}$的情况下，响应仍处于准静态状态。然而，在这些情况下，如果本构方程与速率相关（例如蠕变情形），模拟中就必须采用实际加载速率，而显式求解器的条件稳定性便会成为难以逾越的挑战。

本研究还有一项更普遍的启示，涉及在缺乏精确参考解时如何解读数值差异。对于 LDPM 所模拟的这类高度非线性、非均质材料响应，不存在解析解或“精确”解；即使是实验观测，也无法唯一确定整体响应和局部断裂演化。在这种情况下，求解器验证必须依赖相对一致性，而非精确吻合。本研究的一项关键成果是证明：对于范围广泛的基准算例和数值策略，所有实现所产生的整体和局部响应均保持一致，彼此差异仅有几个百分点；即使在最具挑战性的模拟中，从宏观量、能量度量和裂纹模式指标来看也是如此。与 LDPM 响应固有的随机性相比，这种程度的偏差很小；许多以往研究指出，这种随机性源于随机颗粒布置、几何镶嵌和非均质应力重分布。当求解器之间的数值差异低于或处于这种固有的细观尺度变异性范围内时，应将它们视为对同一物理响应的数值等效表征，而非有意义的偏差。这一观点对于公平评估不同数值策略至关重要，也进一步印证了这一结论：观察到的差异主要反映了离散非均质建模中不可避免的变异性，而非任何特定求解器或实现的缺陷。

数据可用性

本文所呈现的和几何输入 数据可在 10.5281/zenodo.18197080 获取。详细的几何描述 所有基准算例的输入文件均可通过同一链接获取。 s

致谢

Erol Lale、Ke Yu、Bahar Ayhan、Giovanni Di Luzio、Matthew Troemner 和 Gianluca Cusatis 的研究工作部分由工程研究与发展中心（ERDC）建筑工程研究实验室（CERL）通过合同编号 W9132T22C0015 资助。

Jan Eli´aˇs 和 Monika Stˇredulov´a 感谢捷克科学基金会通过项目 GA24-11845S 提供的资金支持。Monika 还感谢布尔诺市政府资助的布尔诺博士人才奖学金，该奖学金用于在 OAS 中实现 LDPM材料模型。

Julien Khoury 和 Gilles Pijaudier-Cabot 感谢法国未来投资项目（ANR-16-IDEX-0002）通过 E2S Hub Ne wpores 提供的资金支持，感谢欧盟地平线2020研究与创新计划下的 EDENE 项目（玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里资助协议编号：945416）提供的支持，并感谢 Communaut´e d'Agglom´eration Pau – B´earn – Pyr´en´ees 提供的支持。

Tianju Xue 和 Jiawei Zhong 感谢香港研究资助局青年协作研究资助（YCRG）提供的支持（项目编号：C6002-24Y）。

本研究部分得益于西北大学 Quest 高性能计算设施所提供的计算资源和工作人员的支持。该设施由教务长办公室、科研办公室和西北大学信息技术部门共同支持。

A 材料参数与本构模型

A.1 断裂行为

断裂行为 当法向应变为正时（$e_N > 0$），便会发生断裂。牵引力由有效
牵引力 t 和有效 有效应变，e，如下所示 [91]

$$t_N = \frac{t}{e} e_N \qquad t_M = \alpha \frac{t}{e} e_M \qquad t_L = \alpha \frac{t}{e} e_L \tag{5}$$

假设有效牵引力 $t = \sqrt{t_N^2 + (t_M^2 + t_L^2)/\alpha}$ 为增量弹性，$\dot{t} = E_0 \dot{e}$，且具有有效应变 $e = \sqrt{e_N^2 + \alpha(e_M^2 + e_L^2)}$，并应满足不等式 $0 \le t \le \sigma_{bt}(e,\ \omega)$，其中 $\sigma_{bt}(e,\ \omega)$ 是通过垂直返回算法施加的应变相关边界，可表示为

$$\sigma_{bt}(e, \omega) = \sigma_0(\omega) \exp\left[-H_0(\omega) \frac{\langle e_{\max} - e_0(\omega) \rangle}{\sigma_0(\omega)} \right] \tag{6}$$

其中，Macaulay括号 $\langle x \rangle = \max(x,\ 0)$ 返回自变量的正部。该边界 σ_{bt}会随着模拟过程中达到的最大有效应变 $e_{\max}$ 而呈指数演化。耦合变量 $\tan(\omega) = e_N / \sqrt{\alpha (e_M^2 + e_L^2)}$ 用于衡量剪切与法向加载之间的相互作用程度。变量 $\sigma_0(\omega)$ 是有效牵引力的强度极限，定义为

$$\sigma_0(\omega) = \sigma_t \frac{-\sin(\omega) + \sqrt{\sin(\omega)^2 + 4\alpha \cos(\omega)^2 / r_{st}^2}}{2\alpha \cos(\omega)^2 / r_{st}^2} \tag{7}$$

其中，r_{st} 是剪切强度与抗拉强度之比，$r_{st} = \sigma_s / \sigma_t$ 边界 σ_{bt} 的指数衰减始于最大有效应变达到其弹性极限 e_0（ω）$= \sigma_0$（ω）$/E_0$。衰减速率由峰后斜率决定，也称为软化模量，假定其遵循内变量 ω的幂函数。

$$H_0(\omega) = \frac{H_s}{\alpha} + \left(H_t - \frac{H_s}{\alpha} \right) \left(\frac{2\omega}{\pi} \right)^{n_t} \tag{8}$$

其中，$H_t = 2E_0/$（$l_t/l - 1$）和 $l_t = 2E_0 G_t / \sigma_t^2$。$G_t$ 是断裂能，l 是与当前面片对应的四面体边长。$H_s = r_s E_0$。在大多数情况下，$r_s = 0$。图1e给出了根据这些本构方程得到的牵引力-应变曲线示例。

在卸载过程中，有效牵引力随有效应变发生弹性减小，直至降为零；随后，即使有效应变进一步减小，有效牵引力仍保持为零。在再加载过程中，有效牵引力保持为零，直到有效应变达到再加载应变极限 $e_{\mathrm{tr}} = k_t(e_{\max} - \sigma_{bt}/E_0)$。超过该阈值后，有效牵引力将以弹性方式增加。材料参数 k_t 控制滞回循环的大小和耗散能。

A.2 压缩行为

对于压缩行为（$e_N < 0$），法向牵引力满足不等式 $-\sigma_{bc}(e_D,\ e_V) \le t_N \le 0$。假定法向牵引力 t_N 在边界 $t_N = E_{Nc}\dot{e}_N$ 内具有增量弹性。 E_{Nc} 是加载-卸载刚度，该刚度在卸载过程中增加。

$$E_{Nc} = \begin{cases} E_0 & -t_N \le \sigma_{c0} \\ E_d & \text{otherwise} \end{cases} \tag{9}$$

压缩边界可表示为

$$\sigma_{bc}(e_D, e_V) = \begin{cases} \sigma_{c0} & -e_{DV} \le 0 \\ \sigma_{c0} + \langle -e_{DV} - e_{c0} \rangle H_c\left(r_{DV}\right) & 0 \le -e_{DV} \le e_{c1} \\ \sigma_{c1}(r_{DV}) \exp\left[(-e_{DV} - e_{c1}) \dfrac{H_c(r_{DV})}{\sigma_{c1}(r_{DV})}\right] & \text{otherwise} \end{cases} \tag{10}$$

其中， $e_{DV} = e_V + \beta e_D$ （β 为材料参数， e_V 为根据四面体体积计算的体积应变， $e_D = e_N - e_V$ 为偏应力），$e_{c0} = \sigma_{c0}/E_0$ 为孔隙塌陷开始时的压密应变， $e_{c1} = \kappa_{c0} e_{c0}$ 为再硬化开始时的压密应变， κ_{c0} 为控制再硬化的材料参数， σ_{c1}（r_{DV}）$= \sigma_{c0} +$（$e_{c1} - e_{c0}$）H_c（r_{DV}）。 H_c（r_{DV}）为初始硬化模量

$$H_c(r_{DV}) = \frac{H_{c0} - H_{c1}}{1 + \kappa_{c2}\langle r_{DV} - \kappa_{c1} \rangle} + H_{c1} \tag{11}$$

且 r_{DV} 为偏应变与体积应变之比

$$r_{DV} = \begin{cases} -\dfrac{|e_D|}{e_V - e_{V0}}, & e_V \le 0 \\ \dfrac{|e_D|}{e_{V0}}, & e_V > 0 \end{cases} \tag{12}$$

其中 $e_{V0} = \kappa_{c3}\sigma_{c0}/E_0$。

图 1f 给出了根据这些本构方程得到的牵引力-应变曲线示例。

A.3 摩擦行为

在压缩情况下，摩擦效应会使剪切强度增大。摩擦现象通过经典增量塑性进行模拟，而增量牵引力可定义为 $\dot{\sigma}_M = E_0\alpha(\dot{e}_M - \dot{e}_M^p)$，$\dot{\sigma}_L = E_0\alpha(\dot{e}_L - \dot{e}_L^p)$。假设塑性应变增量遵循正交性法则 $\dot{e}_M^p = \lambda\partial\phi/\partial t_M$，$\dot{e}_L^p = \dot{\lambda}\partial\phi/\partial t_L$。塑性势可表示为 $\phi = \sqrt{t_M^2 + t_L^2} - \sigma_{bs}(t_N)$，其中剪切强度$\sigma_{bs}$ 的计算方式如下：

$$\sigma_{bs}(\sigma_N) = \sigma_s + (\mu_0 - \mu_\infty)\sigma_{N0} - \mu_\infty t_N - (\mu_0 - \mu_\infty)\sigma_{N0}\exp(t_N/\sigma_{N0}) \tag{13}$$

其中， σ_s 为黏聚力（剪切强度）， μ_0 和 μ_∞ 分别为初始和最终摩擦系数， σ_{N0} 为摩擦系数从 μ_0 过渡到 μ_∞时对应的法向牵引力。当剪切软化模量 $H_s \ne 0$ （纯剪切下的软化）时，黏聚力 σ_s 会退化，其中 $H_s = r_s E_0$。在大多数情况下，$r_s = 0$。

参考文献

[1] G. Cusatis、D. Pelessone 和 A. Mencarelli。“用于描述混凝土破坏行为的格子离散颗粒模型（LDPM）。I：理论”。载于：水泥与混凝土复合材料 33.9（2011），第 881–890 页。 DOI：10.1016/j.cemconcomp.2011.02.011.[2] M. A. Troemner。《混凝土的多尺度格子离散颗粒建模：细观力学、尺度效应与动力学》。博士论文。西北大学，2022 年。[3] W. Li、R. Rezakhani、C. Jin、X. Zhou 和 G. Cusatis。“用于模拟页岩各向异性力学行为的多尺度框架”。载于：《国际岩土力学数值与分析方法》41.14（2017），第 1494–1522 页。 DOI：10.1002/nag.2684。

参数	符号	数值	unit
密度	ρ	2 380	kg/m^3
法向模量	E_0	60 273	MPa
阿尔法	α	0.25	
抗拉强度	σ_t	3.44	MPa
拉伸特征长度	l_t	500	mm
断裂能	G_t 或 $(l_t\sigma_t^2/(2E_0))$	0.0491	N/mm
剪切强度比	r_t 或 (σ_s/σ_t)	2.6	
软化指数	n_t	0.4	
压缩屈服强度	σ_{c0}	150	MPa
初始硬化模量比	H_{c0}/E_0	0.40	
过渡应变比	κ_{c0}	4	
偏应变阈值比	κ_{c1}	1	
偏应力损伤参数	κ_{c2}	5	
体积应变参数	κ_{c3}	0.1	
初始摩擦	μ_0	0.4	
渐近摩擦	μ_∞	0	
过渡应力	σ_{N0}	600	MPa
致密化比	E_d/E_0	1	
体积-偏应力耦合	β	0	
拉伸卸载	k_t	0	
剪切卸载	k_s	0	
压缩卸载	k_c	0	
剪切软化模量比	r_s	0	
最终硬化模量比	H_{c1}/E_0	0.1	

表 15：全文使用的 LDPM 材料参数。

[4] W. Li、X. Zhou、J. W. Carey、L. P. Frash 和 G. Cusatis。“用于模拟页岩断裂渗透率的多物理场格点离散颗粒建模（M-LDPM）”。载于：《岩石力学与岩石工程》51.12（2018），第 3963–3981 页。 DOI: 10.1007/s00603-018-1625-8。[5] S. E. Ashari、G. Buscarnera 和 G. Cusatis。“用于描述颗粒岩石压力相关非弹性的格子离散颗粒模型”。载于：《国际岩石力学与矿业科学杂志》91（2017），第 49–58 页。 DOI: 10.1016/j.ijrmms.2016.10.007。[6] L. Yang、M. Troemner、G. Cusatis 和 H. Su。“一种颗粒材料粒径分布的新型解析模型”。载于：《计算机辅助工程》（41，2024），第 645–665 页。 ISSN: 1435-5663。 DOI: 10.1007/s00366-024-02042-7。[7] H. Herrmann、A. Hansen 和 S. Roux。“二维无序弹性晶格的断裂”。载于：《物理评论*B*》39.1（1989），第 637–648 页。 ISSN: 1098-0121。 DOI: 10.1103/PhysRevB.39.637。[8] E. Schlangen 和 J. Van Mier。“用于数值模拟混凝土材料与结构断裂的简易晶格模型”。载于：《材料与结构》25.9（1992），第 534–542 页。 DOI: 10.1007/BF02472449。[9] E. Schlangen 和 J. G. M. van Mier。“水泥基复合材料中的剪切断裂，第二部分：数值模拟”。载于：Z. P. Baˇzant。《混凝土断裂力学》。纽约：爱思唯尔，1992 年，第 671–676 页。[10] J. Bolander Jr 和 S. Saito。“利用随机几何弹簧网络进行断裂分析”。载于：《工程断裂力学》61.5-6（1998），第 569–591 页。[11] J. E. Bolander、K. Yoshitake 和 J. Thomure。“利用弹性均匀刚体弹簧网络进行应力分析”。载于：《结构力学与地震工程杂志》，*JSCE*633(I-49)（1999），第 25–32 页。[12] Z. P. Baˇzant、M. R. Tabarra、T. Kazemi 和 G. Pijaudier-Cabot。“用于骨料或纤维复合材料断裂的随机颗粒模型”。载于：*Journal of Engineering Mechanics, ASCE* 116(8)（1990），第 1686–1705 页。 DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(1990)116:8(1686)。[13] P. A. Cundall。*BALL*——一种使用离散单元法模拟颗粒介质的程序。技术说明。伦敦：Advanced Thech. Group、Dames and Moore，1978 年。

[14] P. A. Cundall 和 O. D. L. Strack。《颗粒集合体的离散数值模型》。载于：Geotechnique 29（1979），第 47–65 页。[15] A. A. Serrano 和 J. M. Rodriguez-Ortiz。《对非均质颗粒介质力学的贡献》。载于：塑性与土力学研讨会论文集，1973。[16] J. M. Rodriguez-Ortiz。《采用类比模型和数学非连续模型研究非均质颗粒介质的行为》。西班牙马德里 28040：马德里理工大学，1974。´A. Zubelewicz。《接触单元法》。（波兰语）。波兰华沙：华沙技术大学，1980。[17] G. Cusatis、Z. P. Baˇzant 和 L. Cedolin。《用于混凝土裂纹扩展的约束-剪切晶格 CSL 模型》。载于：《计算力学与工程中的计算方法》195.52（2006），第 7154–7171 页。[18] : 10.1016/j.cma.2005.04.019。DOIG. Cusatis、Z. P. Baˇzant 和 L. Cedolin。《用于混凝土拉伸和压缩损伤的约束-剪切晶格模型：II. 计算与验证》。载于：Journal of Engineering Mechanics 129.12（2003），第 1449–1458 页。[19] : 10.1061/(ASCE)0733-9399(2003)129:12(1449)。 DOIG. Cusatis、A. Mencarelli、D. Pelessone 和 J. Baylot。《用于混凝土破坏行为的晶格离散颗粒模型（LDPM）。II：标定与验证》。载于：水泥与混凝土复合材料 33.9（2011），第 891–905 页。[20] : 10.1016/j.cemconcomp.2011.02.010。 DOIE. A. Schauffert 和 G. Cusatis。《纤维增强混凝土晶格离散颗粒模型（LDPM-F）：I. 理论》。载于：Journal of Engineering Mechanics 138.7（2012），第 826–833 页。[21] : 10.1061/(ASCE)EM. 1943-7889.000038。 DOIZ. Zhu、M. Pathirage、W. Wang、M. Troemner 和 G. Cusatis。《多轴约束下混凝土循环拉伸-压缩行为的晶格离散颗粒建模》。载于：《建筑与建材》352（2022），第 128985 页。[22] : 0950-0618。 ISSN: 10.1016/j.conbuildmat.2022.128985。 DOIJ. Smith 和 G. Cusatis。《普通混凝土板和纤维增强混凝土板中弹丸侵彻与贯穿破坏的数值分析》。载于：International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics 41.3（2017），第 315–337 页。[23] : 10.1002/nag.2555。 DOIE. Lale、R. Rezakhani、M. Alnaggar 和 G. Cusatis。《晶格离散颗粒模型（LDPM）的均匀化粗粒化（HCG），用于钢筋混凝土结构分析》。载于：Engineering Fracture Mechanics 197（2018），第 259–277 页。[24] : 10.1016/j.engfracmech.2018.04.043。 DOIM. Alnaggar、D. Pelessone 和 G. Cusatis。《钢筋混凝土抗弯行为的晶格离散颗粒建模》。载于：结构工程杂志 145.1（2019），第 04018231 页。[25] : 10.1061/(ASCE)ST.1943-541X.00022。 DOIT. Bhaduri、S. Gomaa 和 M. Alnaggar。《超高性能混凝土梁中离散配筋与连续配筋相互作用的实验与计算研究。II：细观尺度建模》。载于：工程力学杂志 147（9，2021），第 04021050 页。[26] : 0733-9399。 ISSN: 10. 1061/ (ASCE)EM.1943-7889.0001941。 DOIM. Alnaggar、G. Di Luzio 和 G. Cusatis。《变化环境条件下碱-硅反应影响混凝土时变行为的建模》。载于：材料 10.5（2017）。[27] : 1996-1944。 ISSN: 10.3390/ma10050471。DOIL. Yang、M. Pathirage、H. Su、M. Alnaggar、G. Di Luzio 和 G. Cusatis。《温度和相对湿度对碱-硅反应引起的混凝土膨胀影响的计算建模》。载于：水泥与混凝土复合材料 124（2021），第 104237 页。[28] : 0958-9465。 ISSN: 10.1016/j.cemconcomp.2021. 104237。 DOIL. Shen、W. Li、X. Zhou、J. Feng、G. Di Luzio、Q. Ren 和 G. Cusatis。《用于模拟混凝土热剥落的多物理场晶格离散颗粒模型》。载于：水泥与混凝土复合材料 106（2020），第 103457 页。[29] : 10.1016/j.cemconcomp.2019.103457。 DOIM. Pathirage、D. P. Bentz、G. Di Luzio、E. Masoero 和 G. Cusatis。《用于预测混凝土自干燥的多尺度框架》。载于：混凝土结构计算建模：混凝土与混凝土结构计算建模会议论文集（EURO-C 2018）。2018，第 203–207 页。

[31] M. Pathirage、F. Bousikhane、M. D'Ambrosia、M. Alnaggar 和 G. Cusatis。《碱-硅反应对老化砂浆试件力学性能的影响：实验与数值建模》。载于：International Journal of Damage Mechanics 28.2（2019），第 291–322 页。 DOI: 10.1177/1056789517750213。[32] H. Yin、M. Troemner、W. Li、E. Lale、L. Yang、L. Shen、M. Alnaggar、G. Di Luzio 和 G. Cusatis。《基于进程间通信的隐式-显式多物理场晶格离散颗粒模型模拟双向耦合方法》。载于：Engineering Fracture Mechanics（2024），第 110515 页。 DOI: 10. 1016/j.engfracmech.2024.110515。[33] Z. P. Baˇzant。《基于裂纹相互作用细观力学的非局部损伤理论》。载于：Journal of Engineering Mechanics 120.3（1994），第 593–617 页。 DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(1994)120:3(593)。[34] J. De Vree、W. Brekelmans 和 M. Van Gils。《连续介质损伤力学中非局部方法的比较》。载于：Computers & Structures 55.4（1995），第 581–588 页。 DOI: 10.1016/0045-7949(94)00501-S。[35] G. Di Luzio。《用于混凝土断裂的对称超非局部微平面模型 M4》。载于：International Journal of Solids and Structures 44.13（2007），第 4418–4441 页。 DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2006.11.030。[36] R. H. Peerlings、R. de Borst、W. M. Brekelmans 和 J. de Vree。《准脆性材料的梯度增强损伤》。载于：《国际工程数值方法杂志》39.19（1996），第 3391–3403 页。 DOI: 10.1002/(SICI)1097-0207(19961015)39:19<3391::AID-NME7>3.0.CO;2-D。[37] G. Pijaudier-Cabot 和 Z. P. Baˇzant。《非局部损伤理论》。载于：工程力学杂志 113.10（1987），第 1512–1533 页。 DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(1987)113:10(1512)。[38] P. Havl´asek、P. Grassl 和 M. Jir´asek。《利用积分型非局部模型分析准脆性材料的强度尺寸效应》。载于：Engineering Fracture Mechanics 157（2016），第 72–85 页。 DOI: 10.1016/j.engfracmech.2016.02.029。[39] E. Lale、X. Zhou 和 G. Cusatis。《高阶微平面模型的等几何实现：用于模拟高阶弹性、软化和局部化》。载于：《应用力学杂志》84.1（2017），第 011005 页。 DOI: 10.1115/1.4034784。[40] G. Pijaudier-Cabot 和 J. Khoury。《准脆性材料损伤力学：连续介质与格子描述》。载于：Comprehensive Mechanics of Materials（第一版）。V. Silberschmidt 编。第一版。牛津：爱思唯尔，2024，第 303–324 页。 ISBN: 978-0-323-90647-0。 DOI: 10.1016/B978-0-323-90646-3.00036-8。[41] R. de Borst。《应变软化固体分岔后及破坏后行为的计算》。载于：Computers & Structures 25.2（1987），第 211–224 页。 ISSN: 0045-7949。 DOI: 10.1016/0045-7949(87)90144- 1。[42] R. Courant、K. Friedrichs 和 H. Lewy。《数理物理中的偏差分方程》。载于：IBM journal of Research and Development 11.2（1967），第 215–234 页。 DOI: 10.1147/rd.112.0215。[43] O. C. Zienkiewicz 和 R. L. Taylor。《有限元法：固体力学》。第 2 卷。Butterworth-Heinemann，2000。[44] K.-J. Bathe。《有限元程序》。Prentice Hall，2006。 ISBN: 978-0979004957。[45] R. D. Cook、D. S. Malkus、M. E. Plesha 和 R. J. Witt。《有限元分析的概念与应用》。John Wiley & Sons，2007。[46] J. Smith、G. Cusatis、D. Pelessone、E. Landis、J. O'Daniel 和 J. Baylot。《超高性能混凝土的离散建模及其在弹丸侵彻中的应用》。载于：International Journal of Impact Engineering 65（2014），第 13–32 页。[47] N. M. Newmark。《结构动力学的一种计算方法》。载于：Journal of the Engineering Mechanics Division 85.3（1959），第 67–94 页。 DOI: 10.1061/JMCEA3.0000098。[48] J. Eli´aˇs、M. Voˇrechovsk´y、J. Skoˇcek 和 Z. P. Baˇzant。《混凝土断裂的随机离散细观尺度模拟：与实验数据的比较》。载于：Engineering Fracture Mechanics 135（2015），第 1–16 页。 ISSN: 0013-7944。 DOI: 10.1016/j.engfracmech.2015.01.004。[49] J. Eli´aˇs 和 M. Voˇrechovsk´y。《随机准脆性介质中的断裂：I. 承载能力与断裂过程区的离散细观尺度模拟》。载于：Engineering Fracture Mechanics 235（2020），第 107160 页。ISSN: 0013-7944。 DOI: 10.1016/j.engfracmech.2020.107160。

[50] D. Jia、J. C. Brigham 和 A. Fascetti。《格子离散颗粒模型的高效静力求解器》。载于：Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering 39.23（2024），第3531–3551页。 DOI：10.1111/ mice.13306。[51] G. Cusatis 和 X. Zhou。《适用于具有多个特征长度的准脆性材料的高阶微平面理论》。载于：Journal of Engineering Mechanics 140.7（2014），第04014046页。 DOI：10 . 1061 / (ASCE)EM.1943-7889.0000747。[52] C. Ceccato、M. Salviato、C. Pellegrino 和 G. Cusatis。《不同横截面形状的约束柱中混凝土破坏与纤维增强聚合物断裂的模拟》。载于：International Journal of Solids and Structures 108（2017），第216–229页。 ISSN：0020-7683。 DOI：http : / / dx . doi . org / 10 . 1016 / j . ijsolstr . 2016 . 12 . 017。 URL：http : / / www . sciencedirect . com /science / article /pii / S0020768316303900。[53] E. Lale、K. Yu、M. Troemner、J. Eli´aˇs、M. Stˇredulov´a、T. Xue、I. Koutromanos、B. Ayhan、G. Pijaudier- Cabot、J. Khoury、D. Toussaint、A. Tasora、M. Pathirage、Y. Lyu、M. Alnaggar、G. D. Luzio、L. Yang、L. Shen 和 G. Cusatis。《采用多种时间积分求解器计算格子离散颗粒模型（LDPM）的响应》。SPREE内部报告第4-3/448O号。土木与环境工程系、科学中心及工程环境保护中心（SPREE），西北大学，2024年。[54] J. S. Archer。《分布质量系统的一致质量矩阵》。载于：Journal of the Structural Division 89.4（1963），第161–178页。 DOI：10.1061/JSDEAG.000093。[55] FreeCAD社区。FreeCAD文档。2023年。 URL：https://www.freecadweb.org/wiki/Main_Page。[56] Python脚本教程。 URL：https://wiki.freecad.org/Python_scripting_tutorial。[57] L. Yang、M. Pathirage、H. Su、M. Alnaggar、G. Di Luzio 和 G. Cusatis。《碱-硅反应引起膨胀与劣化的计算建模：活性骨料粒径范围、粒径分布及含量的影响》。载于：International Journal of Solids and Structures 234-235（2022），第111220页。 ISSN：0020-7683。 DOI：10.1016/j.ijsolstr.2021.111220。[58] A. Tasora、R. Serban、H. Mazhar、A. Pazouki、D. Melanz、J. Fleischmann、M. Taylor、H. Sugiyama 和 D. Negrut。《 Chrono：一个开源多物理场动力学引擎》。载于：High Performance Computing in Science and Engineering：第二届国际会议 HPCSE 2015，捷克共和国 Sol´aˇn，2015年5月25日至28日，修订精选论文第2卷。Springer，2016年，第19–49页。[59] T. Xue、S. Liao、Z. Gan、C. Park、X. Xie、W. K. Liu 和 J. Cao。《JAX-FEM：一种可微分、GPU加速的三维有限元求解器，用于自动逆向设计和机理数据科学》。载于：Computer Physics Communications（2023），第108802页。 DOI：10.1016/j.cpc.2023.108802。[60] J. Eli´aˇs 和 G. Cusatis。《通过渐近展开对混凝土离散介观模型中的质量传输与力学耦合进行均质化》。载于：Journal of the Mechanics and Physics of Solids 167（2022），第105010页。 ISSN：0022-5096。 DOI：10.1016/j.jmps.2022.105010。[61] P. Verpaux、T. Charass 和 A. Millard。《CASTEM 2000：一种结构计算的现代方法》。载于：Fouet, JM; Ladev ˜ ze, P.; Ohayon, R.（编）《结构计算与人工智能》2（1988），第267–287页。[62] M. Pathirage、F. Thierry、D. Tong、G. Cusatis、D. Gr´egoire 和 G. Pijaudier-Cabot。《格子离散颗粒模型动态隐式与显式方法的比较研究》。载于：《混凝土与混凝土结构的计算建模》。CRC Press，2022年。 ISBN：9781003316404。[63] I. Koutromanos。《FE-MultiPhys：用于连续体与结构非线性分析的有限元程序》。2024年。 DOI：https : / / doi . org / 10 . 17603 / ds2 - j5mp - a358。 URL：https : / / www . designsafe - ci . org / data / browser / public / designsafe . storage . published / PRJ - 4154 / %2FPRJ - 4154v3 % 2FDocumentation%20-%20Tutorials?doi=10.17603/ds2-j5mp-a358。[64] B. Chen 和 A. Fascetti。《基于多尺度观测对介观格构离散颗粒模型参数进行随机数据驱动推断》。载于：Journal of the Mechanics and Physics of Solids（208 2025），第106481页。[65] Y. Zhu、D. Jia、J. Brigham 和 A. Fascetti。《钢筋混凝土结构的格子离散颗粒模型：一种新颖的几何一致方法》。载于：Engineering Structures 351（2026），第121989页。

[66] B. Chen、G. Cusatis 和 A. Fascetti。《格子离散颗粒模型的位移控制弧长法》。载于：Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 449（2026），第118567页。[67] Dassault Syst`èmes Simulia Corp.《Abaqus 理论指南》。Abaqus 2016文档。Dassault Syst`èmes Simulia Corp.，2016年。[68] H. M. Hilber、T. J. R. Hughes 和 R. L. Taylor。《改进结构动力学时间积分算法的数值耗散》。载于：《地震工程与结构动力学》5.3（1977），第283–292页。 DOI：10.1002/eqe.4290050306。[69] J. Eli´aˇs。《断裂离散模型的自适应技术》。载于：International Journal of Solids and Structures 100–101（2016），第376–387页。 ISSN：0020-7683。 DOI：10.1016/j.ijsolstr.2016.09.008。[70] J. Maˇsek、J. Kvˇetoˇn 和 J. Eli´aˇs。《混凝土中力学与质量传输耦合离散模型的自适应离散细化》。载于：《建筑与建材》395（2023），第132243页。ISSN：0950-0618。 DOI：10.1016/j.conbuildmat.2023.132243。[71] J. Eli´aˇs、H. Yin 和 G. Cusatis。《通过渐近展开对离散扩散模型进行均质化》。载于：《国际岩土力学数值与分析方法》46（16 2022），第3052–3073页。 ISSN：0363-9061。 DOI：10.1002/nag.3441。[72] J. Eli´aˇs 和 G. Cusatis。《通过能量等价，从微观连续与离散非均质有限代表体积推导宏观应力、偶应力和通量张量》。载于：Co mputer Methods in Applied Mechanics and Engineering 436（2025），第117688页。 ISSN：0045-7825。 DOI：10.1016/j.cma.2024.117688。[73] J. Eli´aˇs 和 G. Cusatis。《具有转动自由度的离散细观力学模型会均质化为Cosserat连续体还是Cauchy连续体？》。载于：Journal of the Mechanics and Physics of Solids 207（2026），第106422页。 ISSN：0022-5096。 DOI：10.1016/j.jmps.2025.106422。[74] J. Chung 和 G. M. Hulbert。《一种改进数值耗散的结构动力学时间积分算法：广义-α 方法》。载于：《应用力学杂志》60.2（1993），第371–375页。 ISSN：0021-8936。 DOI：10.1115/1.2900803。[75] W. L. Wood、M. Bossak 和 O. C. Zienkiewicz。《Newmark方法的阿尔法修正》。载于：《国际工程数值方法杂志》15.10（1980），第1562–1566页。 DOI：10.1002/ nme.1620151011。[76] T. Belytschko、W. K. Liu 和 B. Moran。《连续体与结构非线性有限元》。Wiley，2000 年。 ISBN：0471987735。[77] 英特尔。《英特尔 oneAPI 数学核心函数库（oneMKL）》。最后访问于2024年7月20日。2024年。 URL：https: // www.intel.com/content/www/us/en/docs/oneapi/programming-guide/2024-1/intel-oneapi-math-kernel-library-onemkl.html。[78] J. Bradbury、R. Frostig、P. Hawkins、M. J. Johnson、C. Leary、D. Maclaurin、G. Necula、A. Paszke、J. VanderPlas、S. Wanderman-Milne 和 Q. Zhang。《JAX：Python+NumPy程序的可组合变换》。版本0.3.13。2018年。 URL：http://github.com/jax-ml/jax。[79] M. Takamoto、T. Praditia、R. Leiteritz、D. MacKinlay、F. Alesiani、D. Pfl¨uger 和 M. Niepert。《PDEBench：面向科学机器学习的综合基准测试》。载于：《神经信息处理系统进展》。2022年，第1596–1611页。 DOI：10.48550/arXiv.2210.07182。[80] D. A. Bezgin、A. B. Buhendwa 和 N. A. Adams。《JAX-Fluids：一种用于可压缩两相流的全可微高阶计算流体力学求解器》。载于：Computer Physics Communications 282（2023），第108527页。 DOI：10.1016/j.cpc.2022.108527。[81] D. Kochkov、J. A. Smith、A. Alieva、Q. Wang、M. P. Brenner 和 S. Hoyer。《机器学习加速计算流体力学》。载于：《美国国家科学院院刊》118.21（2021），e2101784118。 DOI：10.1073/pnas.2101784118。[82] T. Xue、S. Adriaenssens 和 S. Mao。《利用图网络学习机械超材料的非线性动力学》。载于：《国际机械科学杂志》238（2023），第107835页。 DOI：10.1016/ j.ijmecsci.2022.107835。[83] G. Wu。《一种基于自动微分、伴随法和加速线性代数的结构形状优化框架》。载于：《结构与多学科优化》66.7（2023），第151页。 DOI：10.1007/s00158-023-03601-0。

[84] A. Fascetti、S. Ichimaru 和 J. E. Bolander：《透水混凝土断裂的随机晶格离散颗粒建模》。载于：*Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering* 37.14（2022），第 1788–1808 页。DOI：10.1111/mice.12816。[85] Z. Wang、C. Oskay 和 A. Fascetti：《反向侵蚀管涌时间演化的三维数值建模》。载于：《计算机与岩土工程》171（2024），第 106381 页。 DOI：10.1016/j. compgeo.2024.106381。[86] A. Fascetti、L. Feo、N. Nistic`o 和 R. Penna：《拉挤GFRP工字梁的腹板-翼缘行为：用于解读实验结果的晶格模型》。载于：《复合材料*B*辑：工程》100（2016），第 257–269 页。 DOI：10.1016/j.compositesb.2016.06.058。[87] J. Bezanson、S. Karpinski、V. B. Shah 和 A. Edelman：《Julia：一种用于技术计算的快速动态语言》。载于：*arXiv* 预印本 *arXiv:1209.5145*（2012）。[88] A. Fascetti、J. E. Bolander 和 N. Nistic´o：《受压混凝土的格子离散颗粒建模：用于参数确定的多尺度实验方法》。载于：*Journal of EngineeringMechanics* 144.8（2018），第 04018058 页。 DOI：10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001480。[89] A. C. Bergan。使用 *Abaqus/Explicit* 和 *16* 至 *512* 个 *CPU*核心对复合材料层合板进行渐进损伤分析的计算性能。技术报告。NASA/STI 收录编号：20190001427。NASA 中心：兰利研究中心，2019。[90] R. Mullen 和 T. Belytschko：《二维波动方程有限元半离散的色散分析》。载于：《国际工程数值方法杂志》18.1（1982），第 11–29 页。[91] G. Cusatis。《混凝土三维随机颗粒模型》。土木工程博士论文。意大利米兰：DIS - 米兰理工大学，2001 年 12 月。