

# 预测复合材料有效性质的聚类有限元分析及相互作用矩阵性质研究

聂英豪, 程耿东\*, 李 征

(大连理工大学 工业装备结构分析国家重点实验室, 辽宁 大连 116024)

**摘要:** 复合材料的非线性力学性质对其优化利用具有重要意义. 基于数据聚类的思想, 提出了聚类有限元分析(FCA)方法快速预测复合材料的非线性力学性质. 在简要介绍 FCA 基本原理和方法的基础上, 重点研究了 FCA 方法中联系施加在块上的均匀本征应变与块平均应力之间的相互作用矩阵, 讨论了其自平衡性、完备性和奇异性. 对于没有引入平均化误差的极限情况(采用常应变单元, 每块一个单元), 相互作用矩阵奇异完备, 给出的块应力在有限元节点上满足平衡条件. 对于一般情况, 由于块内应变平均化引入的误差, 相互作用矩阵非奇异且给出的块平均应力是在块最小势能意义下的平衡力系, 通过补充块应变的协调条件, 采用降阶模型和块最小余能原理仍可以高效近似预测复合材料的非线性有效性质. 由于采用了块内应力应变的平均化, 所得结果可为基于聚类分析的其他降阶模型方法面临类似的问题研究提供参考.

**关键词:** 降阶模型方法; 聚类有限元分析; 相互作用矩阵; 非线性等效性质

**中图分类号:** TB33

**文献标识码:** A

**doi:** 10.7511/dllgxb202005001

## 0 引 言

复合材料是一类由多种组分材料形成的材料. 复合材料的性能可以优于组分材料, 这是因为组分材料之间存在相互作用, 包括基体和夹杂、夹杂和夹杂的相互作用. 鉴于复合材料的这一特点, 通过充分考虑微观尺度组分材料的性质、形貌及其分布, 设计需要的新材料或优化复合材料的宏观性能成为重要研究方向. 为此, 首先需要的就是高效、准确地预测具有不同微结构组分形貌复合材料的有效性质. 采用实验获得复合材料有效性质是一个基本的方法, 但是这种现象学方法需要大量耗时和高额成本的实验, 因此解析和数值的方法一直受到重视. 为了采用解析或数值的方法求得复合材料的等效性质, 考虑组分之间的相互作用是非常重要的<sup>[1]</sup>. 但是, 在大型计算机及有限元方法没有广泛应用的年代, 定量得到这些相互作用是不可能的. 复合材料各组分的相互作用非常重要但又难于求得这一困境, 主导着细观力

学近 50 年的研究工作.

研究这样的相互作用的最经典问题是特征应变问题, 又称夹杂问题, 其研究对象是无限大的各向同性材料(基体材料)中包含一个材料性质不同于基体的夹杂, 求解在无穷远处均匀应力作用下, 夹杂及基体内的应力-应变和位移. 求解夹杂问题的基本思想是将夹杂对基体材料性质的影响处理为作用在基体材料内的虚拟体力(或称之为极化应力), 采用弹性力学中的格林函数和夹杂界面的变形协调条件, 建立极化应力需要满足的方程. Eshelby<sup>[2]</sup>研究了无限大各向同性基体材料中受到均匀特征应变的椭圆形夹杂, 发现夹杂内的应变和应力场是均匀的, 单位均匀特征应变在椭圆夹杂内产生的应变场被称为 Eshelby 张量. 对于各向同性、各向异性基体中其他简单形状的夹杂, 也可以求得其 Eshelby 张量. 对于夹杂性质和基体材料性质不同的问题, Eshelby 给出了等效夹杂法. Eshelby 的这些开创性工作, 包括其基本思想和基本解, 成为细观力学的基础, 并且出现了一

收稿日期: 2020-03-11; 修回日期: 2020-07-30.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(U1906233).

作者简介: 聂英豪(1993-), 男, 博士, E-mail: nieying\_1233@mail.dlut.edu.cn; 程耿东\*(1941-), 男, 教授, 博士生导师, 中国科学院院士, E-mail: chenggd@dlut.edu.cn; 李 征(1982-), 男, 副教授, 硕士生导师, E-mail: lizheng@dlut.edu.cn.

批以单一夹杂理论为基础的、封闭形式的均匀化方法,包括自洽方法<sup>[3-4]</sup>、Mori-Tanaka<sup>[5]</sup>方法和广义自洽方法<sup>[6]</sup>等,这些解析方法取得了很大的成功。

上面这些方法虽然可以在线弹性范围内对复合材料宏观等效性质提供很好的估计,但是这些方法只考虑了有限的微结构信息,例如组分材料体分比信息,无法定量考虑更高阶的微结构信息(包括形状、相对尺寸和位置)<sup>[7]</sup>。

随着有限元方法的发展,采用有限元方法求解等效性质<sup>[8-9]</sup>进入细观力学的研究舞台。宏观的复合材料可以看作尺度远小于宏观材料尺度的代表体元或称单胞周期地在空间排列而形成,材料的等效性质可以通过求解单胞问题得到,所谓单胞问题指的是对代表体元单胞,定义相应的力学控制方程和适当边界条件<sup>[10-12]</sup>。使用有限元方法求解单胞问题,依据渐近均匀化或代表体元理论得到复合材料的有效性质。这样的数值方法可以充分利用微结构的信息,避免传统方法的弱点,给出高精度的有效性质。但是,对于微结构很复杂的单胞,如果考虑微结构的随机性需要选择包含大量夹杂的单胞,单胞的有限元模型会很大,同时还需要选择很多单胞的样本<sup>[13-15]</sup>。如果关注的是复合材料非线性性质,要考虑很多不同的工况,对每一个单胞、每一个工况都需要进行大规模有限元单胞模型的非线性计算。综合考虑这些需求,使得将复合材料性质有效预测的方法应用于材料微结构设计的计算量非常大。所以研究具有复杂微结构非均匀材料单胞问题的高效求解方法受到高度的关注,出现很多不同的方法。这些方法基本上是沿着细观力学中的基本思想,将由于夹杂引起的周期非均匀材料性质的变化,处理作周期均匀各向同性弹性基体材料的周期性变化的虚拟体力,而这一虚拟体力(极化应力)在参考材料中引起的位移应力可以由格林函数求得。无限大均匀各向同性介质中受到单个极化应力的格林函数在弹性力学中很早就得到了解析解,但是,无限大介质中周期分布的极化应力的格林函数(其离散形式则为本文讨论的相互作用矩阵)不仅没有封闭的解析解,直接的数值计算也非常困难。Moulinec等<sup>[16]</sup>基于各向同性参考材料,利用格林函数,建立了极化应力满足的协调条件——周期性

Lippmann-Schwinger(L-S)方程<sup>[17]</sup>。将该方程逐点离散化,根据格林函数的特点和周期性假设应用快速傅里叶变换(FFT)技术,数值上可以求解周期分布极化应力的格林函数,并可进一步求得复合材料的等效性质。在 FFT 基本格式的基础上,后续很多学者进行了深入的研究<sup>[18-22]</sup>,成为细观力学领域近 20 年研究的热点。与求解离散的 L-S 方程平行的另一类方法是基于极化应力格式的 Hashin-Shtrikman(H-S)类型方法<sup>[7,23]</sup>,这类方法的出发点源于 H-S 变分原理<sup>[24-25]</sup>,在变分的框架下提出了基于能量的方案求解等效性质。对于 H-S 类型方法,文献<sup>[26]</sup>证明了参考材料的相互作用算子不论是正定或负定,参考材料的选取不影响变分原理驻值的求解。相比 FFT 基本格式,H-S 类方法的收敛性更好。但是,无论是 H-S 类型方法,还是基于 L-S 方程,都需要引入参考介质、参考材料的格林函数以及使用傅里叶变换技术,参考介质通常取成均匀各向同性,因为其格林函数在频域内可以获得解析表达式。

直接 FFT 方法比直接数值求解(DNS)有限元方法虽然提高了效率,但是如果要求解材料的非线性等效性质,需要的工作量依旧很大。因此变换场分析(TFA)<sup>[27]</sup>、非均匀变换场分析(NTFA)<sup>[28-29]</sup>、正交分解法(POD)<sup>[30-31]</sup>、广义正交分解法(PGD)<sup>[32-33]</sup>等降阶或减缩算法引起人们的关注,这些算法通过实验或人为经验选取位移场模态或者假设局部场是分段均匀的,降低内部变量的个数以减少计算工作量。

近年来,结合数据聚类算法和高效分析非均匀材料单胞问题的方法,建立了一类高效精确的预测非线性等效性质的、数据驱动模型降阶方法,包括基于离散 L-S 方程自洽聚类分析(SCA)<sup>[34]</sup>,基于 H-S 变分原理的 H-S 类型有限元法(HS-FE)<sup>[35]</sup>,以及 Cheng 等提出的基于有限元的聚类分析(FCA)方法<sup>[36]</sup>。

Liu 等提出的 SCA<sup>[34]</sup>降阶方法,其创新点是分块假设思想,假定单胞内在弹性状态下处于相同应变状态的单元,在将来复杂加载的情况下也会有相似的响应,所以可以把材料相同而且应变水平相同的单元划分为一区块,同一块的单元可以在几何上不相邻。在线下阶段,通过聚类算法根据各个单元的材料性质和应变水平划分成不同的区块。在分块的基础上,基于均匀各向同性的参考

材料及相应的格林函数的离散形式(相互作用矩阵),建立各块平均应变增量满足的离散 L-S 方程. 在线上阶段,建立了使用常量均匀参考材料的相互作用矩阵或是更新参考材料相互作用矩阵的自洽分析算法,通过求解增量的离散 L-S 方程,得到单胞的非线性等效性质. 在 SCA 方法的基础上,Liu 等发展了可以预测材料弹塑性软化行为、非均质材料的多晶体塑性行为,以及非均质材料的损伤算法<sup>[37-38]</sup>. Tang 等<sup>[39]</sup>提出了虚拟聚类分析的均匀化算法,改进 SCA 方法并阐明其关键思想,对于一维问题发现了该方法的误差以及预测结果与参考介质性质相关的原因. Li 等<sup>[40]</sup>总结了 3 种基于数据驱动的降阶模型,并且在 SCA 的框架下采用深度神经网络中的卷积神经网络代替传统的本构关系,并用于结构拓扑优化.

基于单胞分块的思想,Wulfinghoff 等提出了 HS-FE<sup>[35]</sup>方法. 该方法引入线弹性参考材料,结合 H-S 三场变分原理建立单胞上的控制方程,在分块的基础上,建立分块离散的 H-S 变分方程,通过预计算,建立各块极化应力场和不协调摄动应变之间的相互作用关系,最后通过建立的 HS-FE 迭代算法求解出单胞的等效应力-应变.

上述的 SCA 及 HS-FE 两类降阶方法都需要引入线弹性的参考材料建立控制方程,都存在选取参考材料的问题,当求解某些问题如既含硬夹杂又含孔洞的材料时,参考材料刚度的选取对收敛性很敏感. 由于参考材料是均匀各向同性的,当预测非均质材料的弹性性质时,也需要迭代求解.

不拘泥于细观力学中引入参考材料的思想,直接在统一的有限元体系下,建立预测非均质材料非线性等效性质的 FCA<sup>[36,41]</sup>方法. 该方法的代表体元模型是线弹性的真实材料,满足周期性边界条件,采用本征应变而不是远场应变加载. 与材料的性质无关,该模型满足 Hill-Mandel 条件,以及具有本征应变加载下单胞和各分块平均应变满足的协调条件. 该方法分为线下及线上两个阶段,在线下阶段,对代表体元分块并建立联系各块受到的均匀本征应变和各块平均应力之间的相互作用矩阵,以构造降阶模型. 在线上阶段,利用降阶模型进行高效的非线性性质预测.

FCA 方法建立线上算法的关键是相互作用矩阵. 传统连续介质细观力学中的相互作用关系算子是各种类型的格林函数,代表一点处某一方向

作用的应力和相应的另一点某一方向位移之间的关系. 在数据驱动降阶类方法中,SCA 中相互作用矩阵是基于参考材料的各块极化应力和应变之间的关系,HS-FE 中的相互作用矩阵是基于参考材料的极化应力和不协调应变之间的关系,FCA 方法中的相互作用矩阵关系则是本征应变和应力之间的关系. 正如文献[26]中对极化应力场中线性算子  $\Gamma$  正定性的讨论,以及文献[19]中对格林函数性质的讨论,上述文章中对这些表示相互作用关系的算子性质的研究是后续方法的理论基础,关系到迭代算法和相关的收敛性. 本文将对 FCA 方法中相互作用矩阵性质进行讨论,由于在文献[36]中已经讨论了 FCA 方法的相互作用矩阵的基本性质,本文主要讨论相互作用矩阵的自平衡性、完备性和奇异性. 自平衡性指,利用相互作用矩阵得到的块平均应力是自平衡的. 完备性指,利用相互作用矩阵可以得到所有的满足自平衡的力系. 相互作用矩阵奇异性的研究和自平衡性、完备性密切相关,并且影响在线阶段的非线性算法.

## 1 FCA 方法简介

FCA 方法不同于其他方法的主要特点是在真实非均匀材料单胞上构造了满足周期性边界条件、用本征应变加载的单胞模型,这一模型满足 Hill-Mandel 条件、单胞中块平均应变满足协调条件,这些条件构成 FCA 预测非线性等效性质的理论基础. FCA 方法的主要步骤包括如何分块和构建相互作用矩阵,以及基于相互作用矩阵构建的线上阶段预测非均质材料等效性质的增量算法.

### 1.1 FCA 方法的单胞模型、协调条件和 Hill-Mandel 定理

考虑一个二维非均匀材料的单胞,在域  $\Omega$  内没有体力, $\Omega = \{(x_1, x_2) | 0 \leq x_1 \leq 1, 0 \leq x_2 \leq 1\}$ ,边界  $\Gamma$  上满足力和位移周期边界条件,假设夹杂和基体的界面完全契合,对其建立控制方程式(1),其中包含单胞的平衡方程(1a)、几何方程(1b)、应力-应变弹性本构关系(1c)、周期性位移边界条件(1e)、固定刚体位移(1f)、周期性力的边界条件(1g). 其中  $\epsilon_{kl}$  为总应变, $\epsilon'_{kl}$  为机械应变,本征应变  $\epsilon_{kl}^*$  是加在单胞上的外载,机械应变为总应变和本征应变之差(式(1d)). 本征应变是细观力

学中的一个概念,指的是非弹性应变,如热膨胀、相变、初应变以及塑性应变.在本文中,本征应变可以看作一个各向异性热应变,相当于“外荷载”的作用.

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (1a)$$

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (1b)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon'_{kl} \quad (1c)$$

$$\epsilon'_{kl} = \epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^* \quad (1d)$$

$$u_i|_{x_1=0} = u_i|_{x_1=1}, u_i|_{x_2=0} = u_i|_{x_2=1} \quad (1e)$$

$$u_i|_{(x_1=0.5, x_2=0.5)} = 0, u_2|_{(x_1=0.5, x_2=1)} = 0 \quad (1f)$$

$$t_i|_{x_1=0} = -t_i|_{x_1=1}, t_i|_{x_2=0} = -t_i|_{x_2=1}; i=1,2 \quad (1g)$$

FCA 方法在线下阶段建立的降阶模型以对单胞的弹性分析为基础,所以上述控制方程中本构关系用弹性关系表示.当进行线上阶段的非线性分析时,式(1c)将代之采用以下非线性本构关系,其中  $\gamma, \omega$  代表材料强化参数:

$$\sigma_{ij} = f(\epsilon'_{kl}, \gamma, \omega) \quad (2)$$

在本方法的不同计算阶段,作为外载的本征应变不同.

为了计算等效性质, FCA 方法对单胞施加均匀的单位本征应变.可以证明,和材料性质无关,此时单胞的平均本征应变和平均机械应变满足协调条件.事实上,机械应变在单胞域上的平均值  $\tilde{\epsilon}'_{kl}$  可以化为

$$\tilde{\epsilon}'_{kl} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \epsilon'_{kl} d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} (\epsilon_{kl} - \epsilon_{kl}^*) d\Omega =$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Gamma} \frac{1}{2}(u_k n_l + u_l n_k) d\Gamma - \tilde{\epsilon}_{kl}^* = -\tilde{\epsilon}_{kl}^* \quad (3)$$

其中,上波浪线  $\sim$  代表单胞的体平均,下文块上的平均应力和平均应变简称为块应力和块应变,  $\Omega$  表示单胞的面积.式(3)的推导利用了周期性位移边界条件(1e),由式(3)可以得到

$$\tilde{\epsilon}'_{kl} + \tilde{\epsilon}_{kl}^* = 0 \quad (4)$$

因此

$$\tilde{\epsilon}_{kl} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \epsilon_{kl} d\Omega = 0 \quad (5)$$

方程(4)、(5)表示了当单胞受到均匀的本征应变时满足如下协调条件:单胞内总应变的平均值为零,平均机械应变与平均本征应变之和等于零.这一协调条件还可以推广为分块形式,当把单胞分成了  $n_c$  块(分块方法见后文),在单胞各分块

内加上分块均匀分布本征应变时,单胞上的平均机械应变和各块本征应变在单胞上的平均值之和为零,即

$$\tilde{\epsilon}'_{kl} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{I=1}^{n_c} \epsilon_{kl}^{*I} \Omega^I \quad (6)$$

其中上标  $I=1,2,\dots,n_c$  代表区块的编号,  $\Omega^I$  为第  $I$  块的面积,在不发生混淆时也用来表示属于该块的单元集合;  $\epsilon_{kl}^{*I}$  表示第  $I$  块内均匀分布的本征应变.分块均匀分布本征应变指,本征应变在每一块内均匀分布,在不同的块之间可以不同.式(4)、(5)、(6)构成了单胞中各种应变满足的协调关系.注意,在总应变、机械应变和本征应变中,只有总应变  $\epsilon_{kl}$  在每一点都满足式(1b)的位移-应变关系,因此是协调的应变,本征应变和机械应变都可以不协调.当单胞受本征应变加载后,在线弹性以及非线性、弹塑性阶段这 3 种块应变都应该满足这些条件,它们是本方法线上阶段建立迭代算法以及更新相互作用矩阵的基础.

对单胞加上均匀本征应变,单胞的应力应变的平均值满足 Hill-Mandel 定理.事实上,

$$\begin{aligned} \widetilde{\sigma_{ij} \epsilon'_{ij}} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sigma_{ij} \epsilon'_{ij} d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sigma_{ij} (\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^*) d\Omega = \\ & \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sigma_{ij} (u_{i,j} - \epsilon_{ij}^*) d\Omega = \\ & \frac{1}{\Omega} \left[ \int_{\Gamma} \sigma_{ij} n_j u_i d\Gamma - \int_{\Omega} \sigma_{ij,j} u_i d\Omega + \right. \\ & \left. \int_{\Omega} \sigma_{ij} (-\epsilon_{ij}^*) d\Omega \right] \quad (7) \end{aligned}$$

利用周期性边界条件和平衡方程,结合协调条件(4),式(7)可以化简得到

$$\widetilde{\sigma_{ij} \epsilon'_{ij}} = \tilde{\sigma}_{ij} \tilde{\epsilon}'_{ij} \quad (8)$$

式(8)表示单胞问题(1)满足的 Hill-Mandel 条件:单胞内应力  $\sigma_{ij}$  与机械应变  $\epsilon'_{ij}$  乘积的平均值等于应力  $\sigma_{ij}$  与机械应变  $\epsilon'_{ij}$  平均值的乘积.需要注意的是,以上推导与材料性质无关,可以应用于单胞的材料非线性分析.

## 1.2 建立降阶模型

在建立单胞有限元模型后, FCA 方法在线下阶段建立降阶模型,分两个步骤.

第一步是分块,结合聚类算法将单胞中的所有单元根据它们的力学响应相似度划分为若干个区块.在本方法中,通过对单胞全域,即全部单元依次加上如下 3 个彼此正交的单位本征应变:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{*(11)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{e}^{(11)}, \boldsymbol{\varepsilon}^{*(22)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{e}^{(22)},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{*(12)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{e}^{(12)} \quad (9)$$

进行单胞的弹性有限元分析,有限元方程为

$$\widehat{\mathbf{K}} \widehat{\mathbf{U}} = \widehat{\mathbf{F}} \quad (10)$$

$$\widehat{\mathbf{K}} = A_{i=1}^{N_{\text{ele}}} \int_{\Omega_e} \widetilde{\mathbf{B}}^T \widetilde{\mathbf{C}} \widetilde{\mathbf{B}} d\Omega_e = \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{B} \quad (11)$$

$$\widehat{\mathbf{F}} = A_{i=1}^{N_{\text{ele}}} \int_{\Omega_e} \widetilde{\mathbf{B}}^T \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}^* d\Omega_e = \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (12)$$

其中 $\widehat{\mathbf{K}}$ 是单胞的刚度矩阵, $\widehat{\mathbf{F}}$ 和 $\widehat{\mathbf{U}}$ 分别是由本征应变产生的、施加在单胞有限元节点的“外力”和引起的节点位移向量。 $A_{i=1}^{N_{\text{ele}}}(\ast)$ 是组集符号,代表将相关量从第 1 到  $N_{\text{ele}}$  个单元组集到结构上。 $\widetilde{\mathbf{B}}$ 、 $\widetilde{\mathbf{C}}$  分别是单元应变-位移矩阵和材料弹性矩阵。式(12)最右端项为相应的矩阵形式,可以用于后面平面应变常应变三角形单元自平衡性的推导, $\mathbf{B}$ 、 $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{C}$  分别为依结构自由度安排的增广单元应变-位移矩阵、单元面积矩阵和弹性矩阵。在施加周期性边界条件的情况下求解有限元控制方程(10),从有限元结果中提取应变集中张量,并应用 K-means 聚类算法将单胞分为  $n_c$  个区块,从而建立起单胞的分块模型。

FCA 方法线下阶段的第 2 步是采用各块上的平均应变和应力作为基本未知数,建立反映单胞材料团簇间微观尺度相互作用的分块相互作用矩阵。由于分块数  $n_c$  远远小于单元数  $N_{\text{ele}}$ ,未知数大幅度地降低从而实现模型降阶。

相互作用矩阵  $\mathbf{D}$  由  $n_c \times n_c$  个子矩阵  $\mathbf{D}^{IJ}$  组成, $I, J$  代表分块编号。其中,每个子矩阵  $\mathbf{D}^{IJ}$  表示当分块单胞模型的第  $J$  个区块受到分块内均匀分布的  $mn$  ( $mn=11, 22, 12$ ) 工况下的单位本征应变  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\Lambda}^{*(mm), J}$  时,第  $I$  个区块内所有的有限单元上产生的应力的体平均  $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_J^{(mm), I}$ 。获得矩阵  $\mathbf{D}$  的方法为对于  $J=1, 2, \dots, n_c$ , 执行下面的步骤:

**步骤 1** 对  $J$  块依次施加  $mn=11, 22, 12$  工况下的均匀分布的单位本征应变  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\Lambda}^{*(mm), J}$ , 下标  $\Lambda$  代表分块上单位的本征应变。即对该块中的所有单元加上单位本征应变(9),而其他块本征应变为零,即

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_e^{*(mm)} &= \boldsymbol{e}^{(mm)}; & e \in \Omega^I \\ \boldsymbol{\varepsilon}_e^{*(mm)} &= \mathbf{0}; & e \notin \Omega^I \end{aligned} \quad (13)$$

这里下标  $e$  表示第  $e$  个单元。

**步骤 2** 在周期性边界条件下求解右端项对应本征应变  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\Lambda}^{*(mm), J}$  的有限元方程(10),获得单胞内所有单元的应力。

**步骤 3** 对  $I=1, 2, \dots, n_c$  块,依次计算第  $I$  块内所有单元的应力  $\sigma_{ij,e}^{(mm)}$  ( $e \in \Omega^I$ ) 的体平均,  $ij=11, 22, 12, \Omega_e$  是第  $e$  个单元的面积。

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{ij}^{I, (mm)} = \frac{1}{\Omega^I} \sum_{e \in \Omega^I} \sigma_{ij,e}^{(mm)} \Omega_e \quad (14)$$

其构成了维度为  $3 \times 3$  的相互作用矩阵  $\mathbf{D}^{IJ}$  的元素,或采用张量的表述:

$$D_{ijkl}^{IJ} = \frac{1}{\Omega^I} \sum_{e \in \Omega^I} \sigma_{ij,e}^{(mm)} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda,kl}^{*(mm), J} \Omega_e \quad (15)$$

从上述构造相互作用矩阵的过程来看,相互作用矩阵提供了自平衡应力场,即对于给定的单位块本征应变  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\Lambda}^*$ , 由

$$\mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}_{\Lambda}^* = \widehat{\boldsymbol{\sigma}}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\Lambda}^* = \begin{pmatrix} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^{*,1} \\ \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^{*,2} \\ \vdots \\ \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^{*,n_c} \end{pmatrix} \quad (16)$$

计算求得的块应力  $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$  是自平衡的,注意到任意的块本征应变,可以写成各块的单位块本征应变之线性组合,因此,对任意的块本征应变,由式(17)计算得到的块应力是自平衡的。

$$\mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}^* = \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (17)$$

该式就是 FCA 方法线下阶段建立的降阶模型,该式显式给出了作用在各块的块本征应变和块应力的关系。其中  $\mathbf{D}$  是维度为  $3n_c \times 3n_c$  的相互作用矩阵,  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$  和  $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$  ( $3n_c \times 1$ ) 列向量分别表示分块均匀的本征应变和块应力:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \begin{pmatrix} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{*,1} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}^{*,J} \\ \vdots \\ \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{*,n_c} \end{pmatrix}, \widehat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^1 \\ \vdots \\ \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^J \\ \vdots \\ \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{n_c} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\varepsilon}^{*,J} = \begin{pmatrix} \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{*(11),J} \\ \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{*(22),J} \\ \widehat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{*(12),J} \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}^J = \begin{pmatrix} \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{(11),J} \\ \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{(22),J} \\ \widehat{\boldsymbol{\sigma}}^{(12),J} \end{pmatrix}; J=1, 2, \dots, n_c \quad (18)$$

为了以下叙述方便,定义总应变和机械应变的分块表示形式分别如下:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^1 \\ \vdots \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^J \\ \vdots \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{n_c} \end{pmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^J = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(11),J} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(22),J} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(12),J} \end{pmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^J = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime 1} \\ \vdots \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime J} \\ \vdots \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime n_c} \end{pmatrix},$$

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime J} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime (11),J} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime (22),J} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\prime (12),J} \end{pmatrix}; \quad J=1,2,\dots,n_c \quad (19)$$

至此,总结线下阶段构建降阶模型的步骤:建立单胞模型,施加均匀分布在整个单胞上的本征应变  $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ , 执行弹性有限元分析, 计算出单胞的应变集中因子, 采用聚类算法将单胞分块; 对各块施加单位块本征应变  $\boldsymbol{\varepsilon}_i^*$ , 执行弹性有限元分析, 构建相互作用矩阵  $\mathbf{D}$ , 建立降阶模型(图 1). 该降阶模型对任意给定的块本征应变, 产生自平衡的块应力.

降阶模型把单胞有限元模型中大量的节点位移未知数转换为很少的未知的块应力, 大大提高了计算效率, 这样做必然降低计算的精度, 文献[36]中讨论了随着分块数目的增加, 预测非线性性质的结果逐渐接近全场精细的有限元结果. 当分块数与单元的个数相同时, 即一块只包含一个单元的极限情况, 如果单元又是常应变单元, 两种方法即 FCA 和 DNS 的结果完全一致.

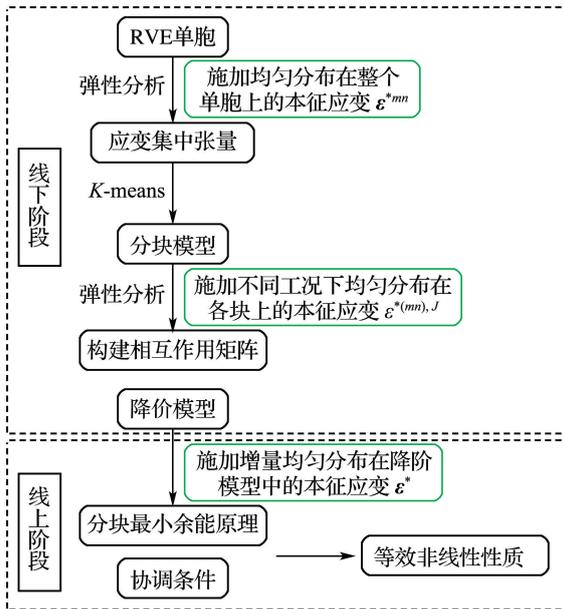


图 1 FCA 方法框架

Fig. 1 The framework of the FCA method

### 1.3 线上计算非线性等效性质的迭代算法

在线上阶段 FCA 方法利用降阶模型进行非

线性等效性质的计算, 已经发展如下两种算法. 算法一: 根据在真实单胞(非均质)弹性阶段计算出的相互作用矩阵, 采用类似传统的弹塑性结构分析中的“初刚度法”, 根据各块的弹塑性性质, 构建逐步增加本征应变的增量迭代算法, 迭代中要求满足协调条件(4)、(5)、(6), 以及 Hill-Mandel 条件(8)[36]. 算法二: 采用由连续介质力学中的最小余能原理建立的分块最小余能原理, 构造迭代算法, 该原理可以表述为, 在所有静态许可的块应力场中, 真实的块应力场(既满足平衡又满足协调)使单胞的总余能最小. 当单胞各块材料性质发生变化时, 分块最小余能原理可以用于更新相互作用矩阵和预测非线性等效性质[41]. 使用分块最小余能原理的前提是要有任意的自平衡块应力场, 而相互作用矩阵恰好可以提供这样的应力场. 这样, FCA 方法整体的框架如图 1 所示.

构造相互作用矩阵时, 依次对各块施加均匀正交的单位本征应变, 由单胞有限元方程求解得到块应力, 这些块应力必然满足平衡, 它们的线性组合仍然是平衡的块应力场. 但是这一证明是构造性的, 由于本方法在分块时每一块的单元可以分散在单胞的不同位置上, 块应力相互平衡的概念和传统的力平衡有显著的不同, 需要进一步通过典型例题阐明和提供更为理性的理解. 除此之外, 是否通过施加分块均匀的块本征应变, 可以得到单胞的所有的自平衡块应力场, 即相互作用矩阵  $\mathbf{D}$  是否完备, 需要进一步研究.

## 2 相互作用矩阵的自平衡性

FCA 方法中降阶模型是基于真实材料的高保真单胞模型, 其待求变量是各块的平均应力, FCA 相互作用矩阵作为线性算子, 连接各块的本征应变和平均应力之间的关系. 需要强调的是, 作为连接单胞中内部降阶变量的桥梁, 这种相互作用算子对建立降阶模型有很重要的作用. 在细观力学的研究中, 连接点与点之间力和位移关系的各种形式的格林函数, 变分 FFT 类方法中的映射算子  $\mathbf{G}^{[42]}$ , SCA 中的相互作用张量  $\mathbf{D}$ , HS-FE 中的算子  $\mathbf{\Gamma}_0$ , 这些描述内部变量之间关系的算子被频繁使用, 对这些算子性质的讨论因此很重要. 本节将在文献[36, 41]中对相互作用矩阵的一些基本性质讨论的基础上, 讨论 FCA 相互作用矩阵的自平衡性.

正如文献[35]一文,本文先讨论最简单的情况,即单胞模型的极限分块情况.在给出详细的证明前,首先给出一个算例.

**算例 1** 取一个二维平面应变单胞,将其划分为 14 个常应变三角形单元,如图 2 所示,一个单元分为一块,不同颜色的单元表示不同的块.考虑两种材料分布:第一种是单胞内材料均匀分布,各块弹性模量为 100 MPa,泊松比为 0.3;第二种是改变第一块的弹性模量为 120 MPa,而其他块材料性质保持不变,这样它成为非均匀材料单胞.采用 1.2 节的算法构建均匀材料和非均匀材料两个单胞的相互作用矩阵  $D_1$  和  $D_2$ .在这个简单例题中,自平衡的验证可以按如下步骤进行:

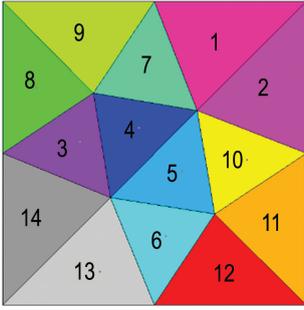


图 2 极限情况下常应变单元模型

Fig.2 Constant strain element model in the limit case

(1)根据式(17)施加任意的块本征应变,形式如式(18),取  $n_c = 14$ ,根据相互作用矩阵可以得到块应力.

(2)由下式计算出与各块应力相对应的节点力  $f^i$ ,并计算出它们在结构的第  $j$  节点的合力  $P^j$ :

$$f^i = \int_{\Omega^i} (\check{B}^i)^T \check{\sigma}^i d\Omega^i = (\check{B}^i)^T A^i \check{\sigma}^i \quad (20)$$

$$P^j = \sum_{i \in N^j} f^i \quad (21)$$

式中: $\check{B}^i$  是  $i$  单元的应变-位移矩阵, $A^i$  代表  $i$  单元的面积矩阵, $f^i$  代表  $i$  单元的节点力矢量, $i = 1 \sim 14$  代表单元标号; $P^j$  为环绕  $j$  节点的单元提供给  $j$  节点的节点力的合力, $N^j$  代表以  $j$  节点为顶点的单元号集合.本文的计算验证了在所有的块与块交界的节点上,即有限元节点上,包括边界上的节点,都满足合力为零的条件.也就是说,无论是均匀单胞的相互作用矩阵  $D_1$ ,还是非均匀单胞的相互作用矩阵  $D_2$ ,在任意施加一组本征应变

后,都可以得到一组在有限元节点上满足平衡的力系.

下面证明对于这种极限分块情况,块应力自平衡性和有限元中节点力的平衡是一致的.

### 2.1 极限分块情况相互作用矩阵的自平衡性证明

对于二维平面问题,令  $\bar{\epsilon}_\Lambda^*$  为单位本征应变矩阵,其第  $N$  列代表第  $N$  个单位块本征应变  $\bar{\epsilon}_\Lambda^{*(N)}$ ,即在式(16)的本征应变向量中第  $N$  个元素为 1,其余元素为零的本征应变, $N = 1, 2, \dots, 3n_c$ . $\bar{\epsilon}$  为总应变矩阵,其第  $N$  列代表加载块本征应变  $\bar{\epsilon}_\Lambda^{*(N)}$  后单胞各块产生的总应变  $\bar{\epsilon}^{(N)}$ ,类似可以定义机械应变矩阵  $\bar{\epsilon}'$ . $\bar{\sigma}$  为应力矩阵,其第  $N$  列是第  $N$  个单位本征应变  $\bar{\epsilon}_\Lambda^{*(N)}$  作用下,各块的应力排列起来的块应力列向量  $\bar{\sigma}^{(N)}$ . $\bar{\sigma}^{(N)}$ 、 $\bar{\epsilon}^{(N)}$ 、 $\bar{\epsilon}_\Lambda^{*(N)}$  的形式参考式(18)、(19)、(16),相关矩阵如下:

$$\bar{\sigma} = (\bar{\sigma}^{(1)} \quad \dots \quad \bar{\sigma}^{(N)} \quad \dots)_{3n_c \times 3n_c} \quad (22)$$

$$\bar{\epsilon} = (\bar{\epsilon}^{(1)} \quad \dots \quad \bar{\epsilon}^{(N)} \quad \dots)_{3n_c \times 3n_c}$$

$$\bar{\epsilon}_\Lambda^* = (\bar{\epsilon}_\Lambda^{*(1)} \quad \dots \quad \bar{\epsilon}_\Lambda^{*(N)} \quad \dots)_{3n_c \times 3n_c} \quad (23)$$

考虑上述应力应变矩阵,由式(1c)、(1d)可以得到

$$D = C\bar{\epsilon}' = C\bar{\epsilon} - C\bar{\epsilon}_\Lambda^* \quad (24)$$

根据式(10),第  $N$  个单位本征应变加载时,节点位移向量和节点力由  $\hat{U}^{(N)}$  和  $\hat{F}^{(N)}$  表示,梳理表述形式,对应本征应变加载的一般情况,节点位移可以写成矩阵  $\bar{U}$ ,本征应变作用的节点“外力”可以写成矩阵  $\bar{F}$ , $N_{\text{dof}}$  代表结构的自由度个数,两者形式为

$$\bar{U} = (\hat{U}^{(1)} \quad \hat{U}^{(2)} \quad \dots \quad \hat{U}^{(N)} \quad \dots)_{N_{\text{dof}} \times 3n_c} \quad (25)$$

$$\bar{F} = (\hat{F}^{(1)} \quad \hat{F}^{(2)} \quad \dots \quad \hat{F}^{(N)} \quad \dots)_{N_{\text{dof}} \times 3n_c}$$

当单胞受到本征应变矩阵  $\bar{\epsilon}_\Lambda^*$  加载后(可以理解在  $3n_c$  个荷载工况),有限元方程(10)可以写成

$$\hat{K} \bar{U} = \bar{F} \quad (26)$$

其中  $\hat{K}$  即总刚度矩阵,根据式(11)的右端项

$$\hat{K} = B^T A C B \quad (27)$$

与此同时,外载矩阵  $\bar{F}$  根据式(12)可以表示为

$$\bar{F} = B^T A C \bar{\epsilon}_\Lambda^* \quad (28)$$

根据式(26)、(28),式(24)可以进一步推导:

$$\begin{aligned} D &= C\bar{\epsilon} - C\bar{\epsilon}_\Lambda^* = C B \bar{U} - C\bar{\epsilon}_\Lambda^* = \\ &= C B \hat{K}^{-1} \bar{F} - C\bar{\epsilon}_\Lambda^* = \\ &= C B \hat{K}^{-1} B^T A C \bar{\epsilon}_\Lambda^* - C\bar{\epsilon}_\Lambda^* \end{aligned} \quad (29)$$

根据矩阵  $D$  的方程(17)有

$$\sigma = D \bar{\epsilon}^* = (C B \hat{K}^{-1} B^T A C \bar{\epsilon}_\Lambda^* - C\bar{\epsilon}_\Lambda^*) \bar{\epsilon}^* \quad (30)$$

为了验证是否满足平衡,需要计算每个节点处的节点力:

$$\mathbf{F}_{\text{total}} = \mathbf{B}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} = (\mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{B} \widehat{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^* - \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^*) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* \quad (31)$$

将式(27)代入式(31)有

$$\mathbf{F}_{\text{total}} = (\widehat{\mathbf{K}} \widehat{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^* - \mathbf{B}^T \mathbf{A} \mathbf{C} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\Lambda}^*) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^* = \mathbf{0} \quad (32)$$

上式合力为  $\mathbf{0}$ , 由此证明了在这一极限分块情形下, 对于任意给定的块本征应变向量  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$ , 由  $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$  求出的应力在有限元节点上是自平衡的。

下面讨论一般的情况, 即各块内包含大量的单元, 同一块内的单元在空间上可以不相邻. 在这样的分块下, 很难用传统意义下连续介质中的平衡和有限元中的节点力平衡来理解块应力的平衡. 下面指出, 由矩阵  $\mathbf{D}$  得到的块应力满足平衡的物理意义是满足分块的最小总势能原理。

结构的最小总势能原理表明在所有静力允许的位移场中, 真实的位移场使系统的总势能最小, 也就是说此时对应的力系满足平衡. 下面首先给出块形式的最小总势能原理, 再证明式(17)是分块最小势能原理下满足的平衡方程。

## 2.2 一般分块情况下相互作用矩阵的自平衡性

回顾单胞问题的控制方程(1), 考虑有体力  $p_i$  的情况, 平衡方程为

$$\sigma_{ij,j} + p_i = 0, (x_1, x_2) \in \Omega \quad (33)$$

取虚位移  $\delta u_i$  为许可位移  $u_i$  的变分, 由于  $u_i$  满足周期性位移边界条件,  $\delta u_i$  满足

$$\delta u_i |_{x_1=0} = \delta u_i |_{x_1=1}, \delta u_i |_{x_2=0} = \delta u_i |_{x_2=1} \quad (34)$$

由于位移是许可函数, 可以定义协调的应变场

$$\delta \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i}) \quad (35)$$

用虚位移做权函数, 将平衡方程和边界条件在区域上积分, 得到

$$\begin{aligned} \delta \Pi_c = & - \int_{\Omega} (\sigma_{ij,j} + p_i) \delta u_i d\Omega + \\ & \int_0^1 (t_i |_{x_1=0} + t_i |_{x_1=1}) \delta u_i |_{x_1=0} dx_2 + \\ & \int_0^1 (t_i |_{x_2=0} + t_i |_{x_2=1}) \delta u_i |_{x_2=0} dx_1 = 0 \end{aligned} \quad (36)$$

对上式中第一项分部积分, 并利用周期性边界条件, 可得

$$\delta \Pi_c = \int_{\Omega} (\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} - p_i \delta u_i) d\Omega \quad (37)$$

式(37)就是在周期性边界条件下单胞满足的最小总势能变分方程。

考虑对单胞加本征应变  $\varepsilon_{ij}^*$ , 在该单胞内产生应力  $\sigma_{ij}^{\Delta}$ , 其值可以采用有限元法求得, 而这个应力可作为外力加到单胞上, 所以  $p_i \delta u_i$  可以写为  $\sigma_{ij}^{\Delta} \delta \varepsilon_{ij}$ , 结合弹性本构关系, 式(37)变为

$$\delta \Pi_c = \int_{\Omega} (C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \delta \varepsilon_{ij} - \sigma_{ij}^{\Delta} \delta \varepsilon_{ij}) d\Omega \quad (38)$$

注意方程(38)等价于不受体力的周期性单胞, 在本征应变作用下的总势能的变分. 根据式(38), 定义本方法中的单胞势能表达式为

$$\Pi_c = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega - \int_{\Omega} \sigma_{ij}^{\Delta} \varepsilon_{ij} d\Omega \quad (39)$$

写成分块形式, 这里并不引起误差

$$\Pi_c = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n_c} \int_{\Omega^k} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\Omega - \sum_{k=1}^{n_c} \int_{\Omega^k} \sigma_{ij}^{\Delta} \varepsilon_{ij} d\Omega \quad (40)$$

现在引入近似, 将每一块内应变用平均应变  $\bar{\varepsilon}_{ij}^k$  代替来近似, 可以得到

$$\Pi_c = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n_c} \bar{\varepsilon}_{ij}^k \int_{\Omega^k} \sigma_{ij} d\Omega - \sum_{k=1}^{n_c} \bar{\varepsilon}_{ij}^k \int_{\Omega^k} \sigma_{ij}^{\Delta} d\Omega \quad (41)$$

再采用精确的积分计算

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega^k} \int_{\Omega^k} \sigma_{ij}^{\Delta} d\Omega &= \bar{\sigma}_{ij}^{\Delta,k} \\ \frac{1}{\Omega^k} \int_{\Omega^k} \sigma_{ij} d\Omega &= \bar{\sigma}_{ij}^k \end{aligned} \quad (42)$$

式(41)化简为

$$\Pi_c = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n_c} \bar{\varepsilon}_{ij}^k \Omega^k \bar{\sigma}_{ij}^k - \sum_{k=1}^{n_c} \bar{\varepsilon}_{ij}^k \Omega^k \bar{\sigma}_{ij}^{\Delta,k} \quad (43)$$

不考虑各应力应变分量表达式, 把式(43)写成向量和矩阵的形式为

$$\Pi_c = \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{V} \bar{\boldsymbol{\sigma}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{V} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{\Delta} \quad (44)$$

式中:  $\mathbf{V}$  是各块的面积对角矩阵, 该式即是 FCA 分块形式的势能表达式. 式(44)中其他项的具体形式参考式(18)、(19). 进一步推导, 利用矩阵  $\mathbf{D}$  的定义式(17), 对单胞加载块本征应变  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\Delta,*}$ , 令其在各块产生的块平均应力等价于  $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{\Delta,k}$ , 即

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}^{\Delta} = \mathbf{D} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\Delta,*} \quad (45)$$

式(44)可以写成

$$\begin{aligned} \Pi_c = & \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{V} \bar{\boldsymbol{\sigma}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{V} \mathbf{D} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\Delta,*} = \\ & \frac{1}{2} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{V} \widehat{\mathbf{C}} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \mathbf{V} \mathbf{D} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\Delta,*} \end{aligned} \quad (46)$$

式中  $\widehat{\mathbf{C}}$  表示分块的刚度矩阵, 根据式(46), 在所有满足静态许可位移场中, 由势能对于参数  $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$  取最小可以得到一组真实的位移, 所谓真实也就是相应的应力满足平衡. 取势能式(46)的变分为零:

$$\delta \Pi_c = \frac{\partial \Pi_c}{\partial \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^T} = 0 \quad (47)$$

可以得到

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{D} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\Delta, *}, \quad (48)$$

该式与式(17)相同,由此可见,由分块最小势能推导得到式(48)与式(17)一样,它们都表示的是平衡关系,给出了在块本征应变  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$  的作用下,降阶模型中满足平衡的块应力  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ .

由上述推导过程可以看到,在推导分块形式的结构势能式(41)时,将每一块内不均匀的应变用平均应变代替,引入了误差.换言之,由式(17)得到的块应力满足平衡是在分块形式的势能原理下成立.当分块数较少时误差较大,当分块数目增加到极限情况,即一个块只包含一个单元,采用的单元是常应变单元时,块应力在节点处满足通常意义下的平衡条件.

### 3 相互作用矩阵的完备性与奇异性研究

相互作用矩阵  $\mathbf{D}$  的完备性是指降阶模型中任意的满足平衡的块应力场都可以通过相互作用矩阵,加载块本征应变得到.矩阵  $\mathbf{D}$  的完备性和奇异性有密切关系<sup>[41]</sup>.就 FCA 方法而言,希望相互作用矩阵  $\mathbf{D}$  是奇异而完备的.因为根据式(17)可知,如果相互作用矩阵非奇异,则任意的一个块应力向量  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ ,其可以是不平衡的力系,都可以通过施加本征应变  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^*$  所得到.这和矩阵  $\mathbf{D}$  的功能是矛盾的.

#### 3.1 极限分块情形矩阵 $\mathbf{D}$ 奇异性及其秩

极限分块情况的矩阵  $\mathbf{D}$  是奇异的,并且可以解析地求得  $\mathbf{D}$  的秩.

将一个平面正方形单胞划分为  $n$  个常应变三角形单元,则单元的应力分量数共有  $3n$  个,这些应力在每个节点上应该满足 2 个平衡方程.周期性边界条件下,记内部节点数为  $m_i$ ,边界上(不包括角点)的节点数为  $m_s$ ,由于对称性,对边上相应的两个节点的独立位移自由度数为 2,只能作为一个节点,单胞的四个角点相当于一个节点.除此之外,需要对一个节点固定刚体位移,所以独立节点数

$$m = m_i + \frac{1}{2} m_s \quad (49)$$

而满足平衡的独立应力分量数为应力分量数减去

独立节点提供的平衡方程数:

$$r_1 = 3n - 2m_i - m_s \quad (50)$$

该值就是矩阵  $\mathbf{D}$  的秩.

注意,满足平衡的独立应力分量数也是在应力空间中满足自平衡的应力所张成的子空间的维数,也就是矩阵  $\mathbf{D}$  的秩.本文通过算例验证了上式的有效性,由此可以得到结论:在极限分块情况相互作用矩阵是奇异且完备的,任何一个自平衡块应力场都可以用矩阵  $\mathbf{D}$  列的线性组合表示,即通过适当选择的本征应变由式(17)得到,另一方面,并不是任何一个块应力场都能够由式(17)根据适当选择的本征应变场表示,因此,不是任何块应力场都是自平衡应力场.后者证明了形成相互作用矩阵  $\mathbf{D}$ 、利用  $\mathbf{D}$  的必要性.

#### 3.2 一般情形下矩阵 $\mathbf{D}$ 的奇异性讨论

对于一块包含多个单元的一般情况,由于采用块平均应变代替块内各单元的应变引入了误差,块应力只是在块最小总势能原理的意义下满足平衡,不满足节点的平衡,因此计算矩阵  $\mathbf{D}$  秩的方法(50)不再适用.数值计算表明,这一误差影响到矩阵  $\mathbf{D}$  的奇异性, $\mathbf{D}$  的行列式值在很多情况下不为零,不是奇异的.但是,对于已经划分好网格的有限元模型,随着分块数增加,相应  $\mathbf{D}$  的条件数不断增大,越来越接近奇异,逐渐接近极限情况.

#### 3.3 奇异和非奇异矩阵 $\mathbf{D}$ 的使用

在 FCA 方法中,矩阵  $\mathbf{D}$  被用于线上阶段预测非均匀材料的非线性有效性质.面对矩阵  $\mathbf{D}$  不同的奇异性情况,随之而来的问题是能否使用矩阵  $\mathbf{D}$  及如何使用最小余能原理更新相互作用矩阵和预测非线性等效性质.回顾文献[41]中分块最小余能原理为

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \Pi_{cl}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\varepsilon}^*) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S} \mathbf{D} \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S} \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (51)$$

式中  $\mathbf{S}$  代表各块的柔度对角矩阵, $\boldsymbol{\alpha}$  是待求的参数.文献[41]基于式(51)提出了当某一块性质改变后,可以将材料性质修改后的柔度矩阵  $\mathbf{S}'$  代替式(51)中的  $\mathbf{S}$ ,得到式(52):

$$\Pi'_{cl}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\varepsilon}^*) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S}' \mathbf{D} \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S}' \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (52)$$

通过求解式(53)得到优化参数  $\boldsymbol{\alpha}$ ,  $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{*(mn), J}$  代表第  $J$  块  $mn$  工况时加载的本征应变,把  $\boldsymbol{\alpha}$  代入式(54)即可得材料更新后的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_{new}$ .

$$F = \min_{\alpha} \Pi'_{cl}(\alpha, \hat{\varepsilon}^{*(nm),J}) \quad (53)$$

$$\mathbf{D}_{new}^{J, nm} = \mathbf{D}\alpha \quad (54)$$

文中的算例证明这一算法的有效性. 但是, 当一块的材料性质变化非常大的情况下, 例如 5 倍以上, 这一算法误差会明显增加. 基于本文对相互作用矩阵性质的研究, 针对矩阵  $\mathbf{D}$  不同的奇异性质, 提出两种格式用于更新相互作用矩阵和预测非线性等效性质.

**格式 1** 对于极限分块情况(或分块数目很多, 接近单元个数), 其相互作用矩阵条件数很大, 矩阵  $\mathbf{D}$  奇异, 对比式(52), 使用的分块最小余能原理格式应该为

$$\min \Pi'_{cl}(\alpha, \varepsilon^*) = \frac{1}{2} \alpha^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S}' \mathbf{D} \alpha + \alpha^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S} \mathbf{D} \varepsilon^* \quad (55)$$

注意式(55)右端第二项的柔度对角矩阵采用的是原模型的柔度矩阵. 求解该无约束优化问题, 可以准确地得到当某块性质改变时, 新的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_{new}$ . 即使某块性质改变量非常大, 这样的格式也可以得到和 DNS 预测一致的结果.

**算例 2** 同样使用上文的算例研究, 对于图 2 模型, 均匀材料的性质与上文一致, 根据均匀材料的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_1$  和各块的柔度对角矩阵  $\mathbf{S}$ , 当第一块弹性模量变为原来的 5 倍后, 通过式(54)、(55)可以计算出更新的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_{new}$ , 与直接使用 DNS 计算变化后的非均匀单胞的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_2$  比较, 两者接近一致(见图 3).

此算例模型分 14 块, 矩阵  $\mathbf{D}$  的维度为  $42 \times 42$ , 图 3(a)、(b)、(c)的纵坐标给出了  $\mathbf{D}$  的  $42 \times 42$  个元素值, 横坐标平面内有  $42 \times 42$  个格点, 代表了这些元素所在的行和列. 其中图 3(a)为原均匀模型的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_1$  (量级  $10^8$  Pa); 图 3(b)和 (c)为材料性质发生改变后的相互作用矩阵, 其中 (b)为采用 DNS 求得的, 记作  $\mathbf{D}_2$ , 因为改变了第一块的弹性性质, 与  $\mathbf{D}_1$  相比整体值增大, 而在 (1,1)位置的元素值明显升高; (c)为采用 FCA 最小余能原理计算的, 记作  $\mathbf{D}_{new}$ ; (d)的纵坐标给出了采用两个不同计算方法得到的非均质材料的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_2$  和  $\mathbf{D}_{new}$  的差异, 可以看到它们大部分元素的差异接近零, 采用最小余能原理更新的相互作用矩阵和采用 DNS 计算的结果基本一致, 说明了极限情况该格式的有效性.

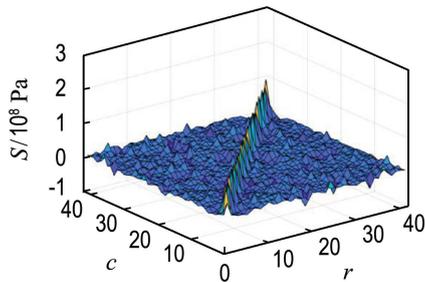
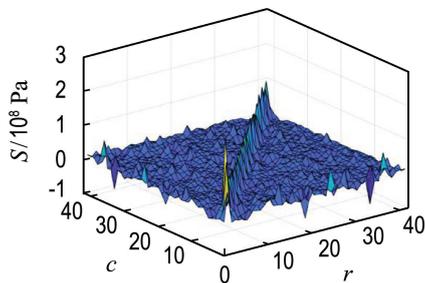
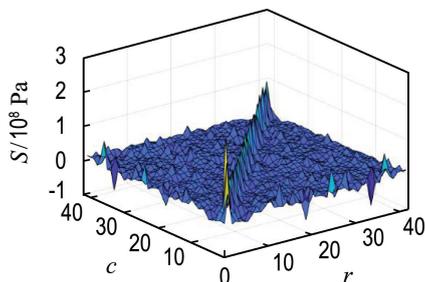
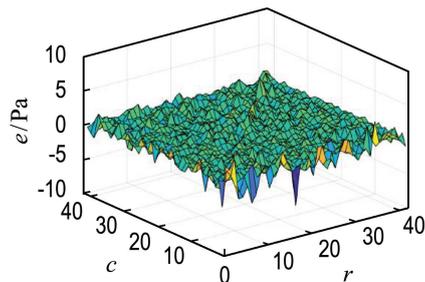
(a) 原模型  $\mathbf{D}_1$ (b) 性质改变模型的  $\mathbf{D}_2$ (c) 最小余能原理更新  $\mathbf{D}_{new}$ (d)  $\mathbf{D}_2$  和  $\mathbf{D}_{new}$  的误差比较

图 3 极限分块下采用最小余能原理更新的相互作用矩阵  $\mathbf{D}_{new}$  和 DNS 结果  $\mathbf{D}_2$  比较

Fig. 3 The comparison of the updated interaction matrix  $\mathbf{D}_{new}$  by using the principle of minimum complementary energy and  $\mathbf{D}_2$  by the DNS in the limit case

**格式 2** 对于一般的分块情况, 由于应变平均化带来的误差, 矩阵  $\mathbf{D}$  数值上非奇异, 所以直接使用式(52)、(53)、(54)的无约束优化结果偏离真实值, 需要增加单胞的协调条件(4)、(5)、(6)来

约束参数的取值. 因此, 更新相互作用矩阵的格式应该为

$$\min \Pi'_{cl}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\varepsilon}^*) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S}' \mathbf{D} \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha}^T \mathbf{D}^T \mathbf{V} \mathbf{S}' \mathbf{D} \boldsymbol{\varepsilon}^*$$

s. t.  $\mathbf{L} \mathbf{S}' \mathbf{D} \boldsymbol{\alpha} + \mathbf{L} \boldsymbol{\varepsilon}^* = \mathbf{0}$  (56)

其中  $\mathbf{L}$  是平均化算子, 约束条件表示平均本征应变与平均机械应变之和等于  $\mathbf{0}$ . 约束条件即式(6)的矩阵形式. 因此结合协调条件的约束, 当相互作用矩阵数值上非奇异时, 也可以近似地建立更新相互作用矩阵的格式.

**算例 3** 考虑一般情况的经典模型, 正方形单胞中间含有一个圆夹杂, 夹杂的弹性模量为 500 MPa, 泊松比为 0.19, 周围基体的弹性模量为 100 MPa, 泊松比为 0.3. 对该模型应用 FCA 方法, 构建分 12 块的降阶模型如图 4 所示. 计算相互作用矩阵  $\mathbf{D}_1$ , 在此分块的基础上, 更改第 2 块的弹性模量为 80 MPa, 用 DNS 计算相互作用矩阵  $\mathbf{D}_2$ . 采用算例 2 中同样的比较方式, 观察采用最小余能原理格式(56)计算的  $\mathbf{D}_{new}$ (图 5(b))和直接 DNS 计算的  $\mathbf{D}_2$ (图 5(a)), 以及这两者差异分布(图 5(c)), 可见大多数元素误差较小, 只有对应于改变的第二块区域, 即两者差异图中第二列误差略微高一些, 这是局部误差的比较.

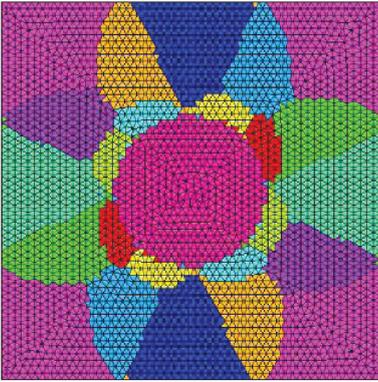
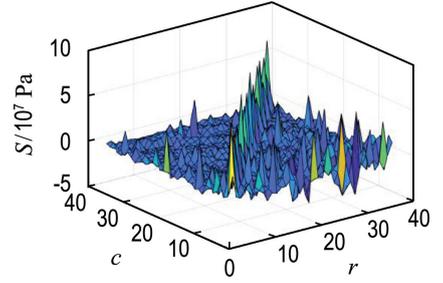


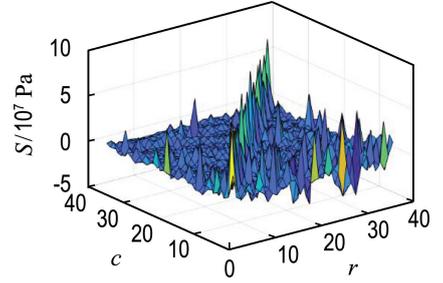
图 4 分 12 块的降阶模型

Fig. 4 The reduced order model of 12 clusters

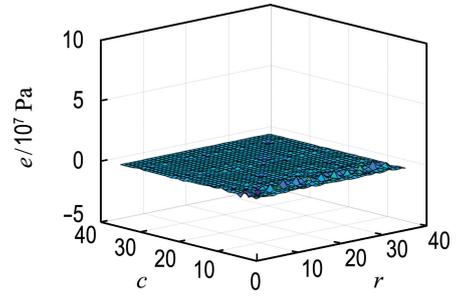
关于更新相互作用矩阵的整体误差分析, 采用类似于有限元中能量范数来进行, 能量范数的含义是近似解和精确解之间单元应变能误差之和的平方根, 实际上, 根据相互作用矩阵计算的整体等效刚度矩阵  $\tilde{\mathbf{C}}$  的系数就是在单位应变下的单胞应变能, 所以, 比较由 DNS 和 FCA 方法最小余能计算的相互作用矩阵得到的等效弹性刚度  $\tilde{\mathbf{C}}$ , 就是按能量范数比较  $\mathbf{D}$  的误差. 因此, 在本文中



(a) 性质改变模型的  $\mathbf{D}_2$



(b) 最小余能原理  $\mathbf{D}_{new}$



(c) 两者差异

图 5 更新相互作用矩阵的误差比较

Fig. 5 Error comparison of updating the interaction matrix

能量范数定义为

$$e = \frac{\|\tilde{\mathbf{C}}_{new} - \tilde{\mathbf{C}}_2\|_2}{\|\tilde{\mathbf{C}}_2\|_2} \quad (57)$$

其中  $\tilde{\mathbf{C}}_2$  代表使用 DNS 计算更新的等效弹性刚度,  $\tilde{\mathbf{C}}_{new}$  代表使用最小余能原理更新的等效弹性刚度. 等效弹性刚度的各个分量大小由式(58)得到,  $D_{klmn}^I$  即相互作用矩阵中的元素.

$$\tilde{C}_{klmn} = \frac{1}{\Omega} \sum_{I=1}^{n_c} \sum_{J=1}^{n_c} D_{klmn}^I \Omega^I; \quad kl, mn = 11, 22, 12 \quad (58)$$

式(59)给出使用式(56)更新的相互作用矩阵得到的等效弹性刚度  $\tilde{\mathbf{C}}_{new}$ , 及 DNS 计算的原模型的等效刚度  $\tilde{\mathbf{C}}_1$  和材料性质改变后的等效弹性刚

度 $\tilde{C}_2$ , 采用能量范数计算的误差值为式(60). 从等效弹性刚度的数值结果对比, 即直接比较 $\tilde{C}_2$ 和 $\tilde{C}_{new}$ 的数值, 以及观察能量范数的结果, 两种比较误差都非常小.

$$\tilde{C}_1 = \begin{pmatrix} 1.534 \times 10^8 & 6.276 \times 10^7 & 1.023 \times 10^3 \\ 6.276 \times 10^7 & 1.534 \times 10^8 & -9.744 \times 10^2 \\ 1.023 \times 10^3 & -9.744 \times 10^2 & 4.428 \times 10^7 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{C}_2 = \begin{pmatrix} 1.448 \times 10^8 & 5.797 \times 10^7 & -3.072 \times 10^3 \\ 5.797 \times 10^7 & 1.448 \times 10^8 & 3.013 \times 10^3 \\ -3.072 \times 10^3 & 3.013 \times 10^3 & 4.076 \times 10^7 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{C}_{new} = \begin{pmatrix} 1.439 \times 10^8 & 5.815 \times 10^7 & -2.831 \times 10^3 \\ 5.815 \times 10^7 & 1.439 \times 10^8 & 3.175 \times 10^3 \\ -3.988 \times 10^3 & 4.080 \times 10^3 & 4.099 \times 10^7 \end{pmatrix} \quad (59)$$

$$e = 0.006\ 061 \quad (60)$$

此外, 深入分析表明, 矩阵 $D$ 是否奇异和协调条件是否满足密切相关. 事实上, 如果采用无约束条件的变分式(56)更新相互作用矩阵, 加载一组块本征应变 $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ , 可以发现协调条件的误差式(61)很大.

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{L}\boldsymbol{S}'\boldsymbol{D}_{new}\boldsymbol{\varepsilon}^* + \boldsymbol{L}\boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (61)$$

其中 $\boldsymbol{e}_1$ 表示单胞中的平均本征应变和平均机械应变之和, 由式(4)可知, 当 $\boldsymbol{e}_1$ 接近 $\mathbf{0}$ 时, 表示单胞中满足整体协调. 由于 $\boldsymbol{e}_1$ 是一个列向量, 采用2范数来衡量误差, 重新整理式(61)形式为

$$e_1 = \|\boldsymbol{L}\boldsymbol{S}'\boldsymbol{D}_{new}\boldsymbol{\varepsilon}^* + \boldsymbol{L}\boldsymbol{\varepsilon}^*\|_2 \quad (62)$$

随机选择50组块本征应变, 采用式(56)不带及带约束条件计算出相互作用矩阵 $\boldsymbol{D}_{new}^1$ 和 $\boldsymbol{D}_{new}^2$ 代入式(62), 可以得到协调误差, 计算的结果列出曲线如图6所示.

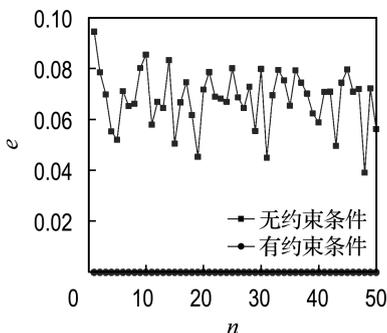


图6 一般不施加约束条件和施加约束条件下单胞的应变协调误差

Fig. 6 In general case the strain compatible error of the unit cell with constraint condition and without constraint condition

从图6可以看到, 不施加约束条件的结果, 在单胞中的平均机械应变和本征应变之间不满足协调, 有一定的误差. 结合上述的能量范数和协调误差的讨论, 观察图5、6结果, 可以充分说明面对矩阵 $D$ 非奇异的情况下, 式(56)的有效性. 实际上如果不施加约束条件, 采用式(56)更新出的相互作用矩阵会与原材料性质模型的矩阵接近.

此外, 为了对极限分块情况下格式1结果的协调进行验证, 对分14块的模型, 第1块性质改变5倍后采用最小余能原理计算出的相互作用矩阵, 随机施加50组块本征应变, 按照上述方式代入式(62), 计算协调误差, 得到的结果如图7所示.

从图7结果可以看出, 协调误差接近零, 说明格式1即使不施加协调条件的约束, 得到的结果也满足协调, 证明了最小余能原理在这种极限分块情况下等价于协调关系的物理意义. 在一般情况下由于引入了分块误差, 这种协调等价的关系被破坏, 为了严格保证协调, 需要添加约束.

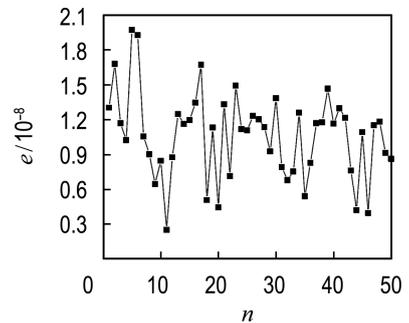


图7 极限情况无约束条件下单胞的应变协调误差

Fig. 7 In the limit case the strain compatible error of the unit cell without constraint condition

总结上述研究, 对于相互作用矩阵的奇异性有以下结论:

(1) 在极限分块情况时, 构建的相互作用矩阵是奇异的, 其秩可以解析求得. 可以按照块最小余能原理格式1得到材料变化时的新的相互作用矩阵, 协调条件自动满足.

(2) 在一般情况下, 即分块数不多时, 分块引入的误差导致相互作用矩阵数值上是非奇异的, 需要强制加上协调条件. 通过补充块应变的协调条件, 采用降阶模型和块最小余能原理仍可高效近似预测复合材料的非线性等效性质. 随分块数目增加, 预测结果误差逐渐降低.

在SCA和HS-FE等方法中, 同样采用了块内

的应力或应变平均化的做法, 引入了误差, 从而使得离散的 L-S 方程等已经不再能表示协调条件, 在分块数不够大时给数值计算带来同样的困难。

## 4 结 语

本文对相互作用矩阵  $D$  的性质进行了详细讨论, 包括  $D$  的自平衡性、完备性和奇异性。

首先, 本文简洁阐释了 FCA 方法及其创新点, 与传统细观力学基于参考材料的出发点不同, FCA 方法不需要引入参考材料, 是直接对真实材料的有限元单胞模型降阶, 相互作用矩阵的建立不需要利用格林函数, 直接通过特定本征应变加载的有限元方式执行。

其次, 复合材料中微结构组分之间的相互作用关系是一类很重要的研究内容, 无论 SCA 方法中的相互作用张量或者 HS-FE 中的 Gamma 算子, 或是 FCA 方法中的相互作用矩阵, 这些算子被频繁地使用却缺乏对算子本身性质的讨论。对于 FCA 方法, 本文深入讨论了相互作用矩阵的自平衡性、奇异性 and 完备性, 深化了对矩阵  $D$  的理解。基于上述对相互作用矩阵的讨论, 可以丰富完善 FCA 方法, 包括快速建立相互作用矩阵, 建立更准确的线上增量算法。

最后, 对矩阵  $D$  性质的研究也促进基于参考材料建立的相互作用矩阵的研究, 当参考材料和真实材料相同时, 本文作者已经建立了 3 种相互作用矩阵的关系并开展了进一步的研究。

## 参考文献:

- [1] WALKER K P, JORDAN E H, FREED A D. Equivalence of Green's function and the Fourier series representation of composites with periodic microstructure [C] // WENG G J, TAYA M, ABÉ H, eds. **Micromechanics and Inhomogeneity: The Toshio Mura 65th Anniversary Volume**. New York: Springer, 1990: 535-558.
- [2] ESHELBY J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems [J]. **Proceedings of the Royal Society of London, Serial A**, 1957, **241**: 376-396.
- [3] HILL R. A self-consistent mechanics of composite materials [J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1965, **13**(4): 213-222.
- [4] HILL R. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles [J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1963, **11**(5): 357-372.
- [5] MORI T, TANAKA K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions [J]. **Acta Metallurgica**, 1973, **21**(5): 571-574.
- [6] CHRISTENSEN R M, LO K H. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models [J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1979, **27**(4): 315-330.
- [7] BRISARD S, DORMIEUX L. Combining Galerkin approximation techniques with the principle of Hashin and Shtrikman to derive a new FFT-based numerical method for the homogenization of composites [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2012, **217-220**: 197-212.
- [8] SUN C T, VAIDYA R S. Prediction of composite properties from a representative volume element [J]. **Composites Science and Technology**, 1996, **56**(2): 171-179.
- [9] SMIT R M, BREKELMANS W M, MEIJER H H. Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 1998, **155**(1/2): 181-192.
- [10] XIA Zihui, ZHOU Chuwei, YONG Qiaolin, *et al.* On selection of repeated unit cell model and application of unified periodic boundary conditions in micro-mechanical analysis of composites [J]. **International Journal of Solids and Structures**, 2006, **43**: 266-278.
- [11] XIA Z, ZHANG Y, ELLYIN F. A unified periodical boundary conditions for representative volume elements of composites and applications [J]. **International Journal of Solids and Structures**, 2003, **40**: 1907-1921.
- [12] YAN Jun, CHENG Gengdong, LIU Shutian, *et al.* Comparison of prediction on effective elastic property and shape optimization of truss material with periodic microstructure [J]. **International Journal of Mechanical Sciences**, 2006, **48**(4): 400-413.
- [13] KANIT T, FOREST S, GALLIET I, *et al.* Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach [J]. **International Journal of**

- Solids and Structures**, 2003, **40** (14/15): 3647-3679.
- [14] SWAMINATHAN S, GHOSH S, PAGANO N J. Statistically equivalent representative volume elements for unidirectional composite microstructures: Part I - Without damage [J]. **Journal of Composite Materials**, 2006, **40**(7): 583-604.
- [15] SWAMINATHAN S, GHOSH S. Statistically equivalent representative volume elements for unidirectional composite microstructures: Part II - With interfacial debonding [J]. **Journal of Composite Materials**, 2006, **40**(7): 605-621.
- [16] MOULINEC H, SUQUET P. A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 1998, **157**(1/2): 69-94.
- [17] ZELLER R, DEDERICHS P. Elastic constants of polycrystals [J]. **Physica Status Solidi: B Basic Research**, 1973, **55**(2): 831-842.
- [18] EYRE D J, MILTON G W. A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement [J]. **The European Physical Journal-Applied Physics**, 1999, **6**: 41-47.
- [19] MICHEL J C, MOULINEC H, SUQUET P. A computational scheme for linear and non - linear composites with arbitrary phase contrast [J]. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2001, **52**(1/2): 139-160.
- [20] VINOGRADOV V, MILTON G W. An accelerated FFT algorithm for thermoelastic and non - linear composites [J]. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2008, **76**(11): 1678-1695.
- [21] MOULINEC H, SILVA F. Comparison of three accelerated FFT - based schemes for computing the mechanical response of composite materials [J]. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2014, **97**: 960-985.
- [22] WILLOT F. Fourier-based schemes for computing the mechanical response of composites with accurate local fields [J]. **Comptes Rendus Mécanique**, 2015, **343**(3): 232-245.
- [23] BRISARD S, DORMIEUX L. FFT-based methods for the mechanics of composites: A general variational framework [J]. **Computational Materials Science**, 2010, **49**(3): 663-671.
- [24] HASHIN Z, SHTRIKMAN S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals [J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1962, **10**(4): 343-352.
- [25] HASHIN Z, SHTRIKMAN S. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity [J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1962, **10**(4): 335-342.
- [26] WILLIS J R. Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites [J]. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, 1977, **25**(3): 185-202.
- [27] DVORAK G J. Transformation field analysis of inelastic composite materials [J]. **Proceedings of the Royal Society of London**, 1992, **437**: 311-327.
- [28] MICHEL J C, SUQUET P. Nonuniform transformation field analysis [J]. **International Journal of Solids and Structures**, 2003, **40** (25): 6937-6955.
- [29] ROUSSETTE S, MICHEL J C, SUQUET P. Nonuniform transformation field analysis of elastic - viscoplastic composites [J]. **Composites Science and Technology**, 2009, **69**(1): 22-27.
- [30] YVONNET J, HE Q C. The reduced model multiscale method (R3M) for the non-linear homogenization of hyperelastic media at finite strains [J]. **Journal of Computational Physics**, 2007, **223**(1): 341-368.
- [31] BERKOOZ G, HOLMES P, LUMLEY J L. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows [J]. **Annual Review of Fluid Mechanics**, 1993, **25**: 539-575.
- [32] CHINESTA F, AMMAR A, LEYGUE A, *et al.* An overview of the proper generalized decomposition with applications in computational rheology [J]. **Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics**, 2011, **166**(11): 578-592.
- [33] LADEVÈZE P, PASSIEUX J C, NÉRON D. The Latin multiscale computational method and the proper generalized decomposition [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2010, **199**(21/22): 1287-1296.
- [34] LIU Z, BESSA M A, LIU W K. Self-consistent clustering analysis: An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2016, **306**: 319-341.
- [35] WULFINGHOFF S, CAVALIERE F, REESE S. Model order reduction of nonlinear homogenization problems using a Hashin - Shtrikman type finite

- element method [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2018, **330**: 149-179.
- [36] CHENG Gengdong, LI Xikui, NIE Yinghao, *et al.* FEM-cluster based reduction method for efficient numerical prediction of effective properties of heterogeneous material in nonlinear range [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2019, **348**: 157-184.
- [37] LIU Z, FLEMING M, LIU W K. Microstructural material database for self-consistent clustering analysis of elastoplastic strain softening materials [J]. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 2018, **330**: 547-577.
- [38] LIU Z, KAFKA O L, YU C, *et al.* Data-driven self-consistent clustering analysis of heterogeneous materials with crystal plasticity [M] // **Advances in Computational Plasticity**. Berlin: Springer, 2018: 221-242.
- [39] TANG S Q, ZHANG L, LIU W K. From virtual clustering analysis to self-consistent clustering analysis; A mathematical study [J]. **Computational Mechanics**, 2018, **62**: 1443-1460.
- [40] LI H Y, KAFKA O L, GAO J Y, *et al.* Clustering discretization methods for generation of material performance databases in machine learning and design optimization [J]. **Computational Mechanics**, 2019, **64**: 281-305.
- [41] NIE Yinghao, CHENG Gengdong, LI Xikui, *et al.* Principle of cluster minimum complementary energy of FEM-cluster-based reduced order method; fast updating the interaction matrix and predicting effective nonlinear properties of heterogeneous material [J]. **Computational Mechanics**, 2019, **64**(2): 323-349.
- [42] ZEMAN J, DE GEUS T W J, VONDRĚJC J, *et al.* A finite element perspective on nonlinear FFT - based micromechanical simulations [J]. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, 2017, **111**(11): 903-926.

## FEM cluster-based analysis (FCA) for predicting effective properties of composite materials and study about interaction matrix

NIE Yinghao, CHENG Gengdong\*, LI Zheng

( State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China )

**Abstract:** The nonlinear mechanical properties of composite material are important for optimum use of the advanced material. Based on the data-clustering idea, the FEM cluster-based analysis (FCA) method is proposed to effectively predict the nonlinear mechanical properties of composite material. The basic concepts and methods of the FCA are briefly introduced and the interaction matrix, which relates the imposed cluster uniform eigenstrains and cluster average stresses is focused. The self-equilibrium, completeness and singularity of the interaction matrix are discussed in details. It is shown that for the limiting case in which each cluster has one constant strain element and no error of averaging process is introduced, the interaction matrix is singular, complete and provides the cluster stress in nodal equilibrium. For general case, due to the error introduced by averaging process, the interaction matrix is nonsingular, and the cluster stress obtained from the interaction matrix is in equilibrium in the sense of minimum potential energy principle. Supplemented by the compatibility condition, the reduced order model together with the cluster-based minimum structural complementary energy principle can be used to provide high efficient prediction of nonlinear effective properties with reasonable accuracy. Since strain and stress averaging process within one cluster is an essential step in all reduced order methods, the results obtained are valuable for reference.

**Key words:** reduced order model method; FEM cluster-based analysis; interaction matrix; nonlinear effective properties