

DOI: 10.7652/xjtuxb201510002

非均质复合材料力学性能的 确定性多尺度计算方法

裴世源¹, 徐华^{1,2}

(1. 西安交通大学现代设计与转子轴承系统教育部重点实验室, 710049, 西安;
2. 新疆大学机械工程学院, 830046, 乌鲁木齐)

摘要: 针对具有多尺度特性的非均质复合材料进行结构强度分析,提出了一种确定性多尺度计算方法——有限细胞法(FCM)。该方法通过矩阵凝聚和插值近似得到粗网格的刚度矩阵,在计算得到粗网格解后,通过回代技术可获得全域细网格解。为验证 FCM 的计算精度和计算效率,构造了多个数值算例,并与理论和有限元(FEM)结果进行了对比,结果发现:相对于 FEM,FCM 可显著扩大计算规模,提高计算速度,且易于并行;相对于其他多尺度计算方法,FCM 在构造粗网格刚度矩阵过程中无需引入微观边界条件,计算精度高,易于降尺度计算。因此,FCM 是分析复合材料结构强度的一种有效的多尺度算法,同时该方法易于推广至多尺度的非线性结构分析、热分析、地下水渗流分析等领域。

关键词: 有限细胞法;多尺度计算;非均质复合材料

中图分类号: TP301.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2015)10-0008-06

Deterministic Multiscale Method for Heterogeneous Composite Material

PEI Shiyuan¹, XU Hua^{1,2}

(1. Key Laboratory of Education Ministry for Modern Design and Rotor-Bearing System, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 2. School of Mechanical Engineering, Xinjiang University, Urumqi 830046, China)

Abstract: For the strength analysis of heterogeneous materials in elasticity, a deterministic multiscale calculation method, finite cell method (FCM), is presented. The condensation and interpolation technique are adopted to obtain the coarse element stiffness matrix, then the original problem can be solved in coarse-scale, and the fine-scale solution can be sought out by back substitution. The comparison with analytic method and finite element method (FEM) on several numerical examples indicates that FCM enables to significantly expand computational scale and greatly improve computing rate. In FCM, the artificial boundary conditions are unnecessary for constructing macroscopic meshes, and the downscaled computing can be easily performed. FCM is also feasible for non-linear multiscale structure analysis, thermal analysis and porous flow analysis.

Keywords: finite cell method; multiscale computation; heterogeneous material

自然界和工程应用中的很多材料都具有多尺度特征,准确描述这些材料的整体细观力学行为是当今科学界和工程界所面临的挑战之一。传统数值方法在求解这些问题时需耗费大量的计算资源,虽然

超级计算机和并行计算的出现在一定程度上缓解了计算难度,但对于很多大规模多尺度问题仍难以求解。在保证计算精度的前提下,发展高效的多尺度计算方法是当今计算力学领域的研究热点^[1-2]。

近些年来,国内外学者已提出了各种多尺度计算方法,其中具有代表性的有渐近均匀化法^[3-7]、多尺度有限元法(MsFEM)^[8-10]、非均质多尺度法(HMM)^[11-12]、代表体元法(RVE)^[13-15]、小波均匀化方法^[16]等。这些方法通常是从宏观域中取出有代表性的体元(微观域),在此体元上构建一个局部边值问题,在得到体元的等效力学参数后,将原结构等效成具有此参数的均匀结构求解宏观域的力学响应。一般来说,选择局部问题边界条件具有较强的主观性和经验性,对计算精度具有显著影响^[9-10],因此构造局部问题合适的边界条件是多尺度计算的重点和难点之一。另一方面,虽然这些多尺度方法均可用于分析结构的宏观力学行为,但通常难以得到结构的微观力学响应(如局部应力和应变等)^[2,11],在很多情况下获得全域精细网格解是至关重要的,如结构强度,疲劳和断裂分析等。

作者曾基于有限元子结构方法提出了有限细胞法(FCM),用于求解表面结构的多尺度润滑问题(标量场问题)效果良好^[17-18]。该方法的基本思想与传统多尺度方法类似,亦是先构建微观域的局部问题,后求解宏观域整体响应。主要不同点在于:①构建局部问题时,无需引入微观边界条件,避免了人为选择的主观性和经验性;②直接通过矩阵运算得到粗网格(细胞)的刚度矩阵和载荷向量,而不是得到微观等效材料参数后,再构建宏观单元的刚度矩阵;③易于降尺度计算。

为对非均质多尺度复合材料进行结构分析,本文以二维连续体问题分析为例,介绍 FCM 求解矢量场问题的基本原理及其实施过程,并通过几个有代表性的数值算例说明其有效性。限于篇幅,本文只介绍 FCM 的基本原理及其在复合材料力学分析中的应用,多尺度润滑问题的分析可参见文献^[17-18],有关 FCM 在多孔介质渗流、传热等问题中的应用将另文论述。

1 有限细胞法

假定有结构如图 1 所示,若将最小的重复单位定为细胞,则该结构由 4 个细胞构成,整体域可由方形细胞和圆形细胞两种组合而成。通常 FCM 的实施包括以下 4 个步骤,如图 2 所示。

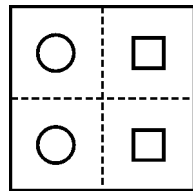


图 1 宏观域结构示意图

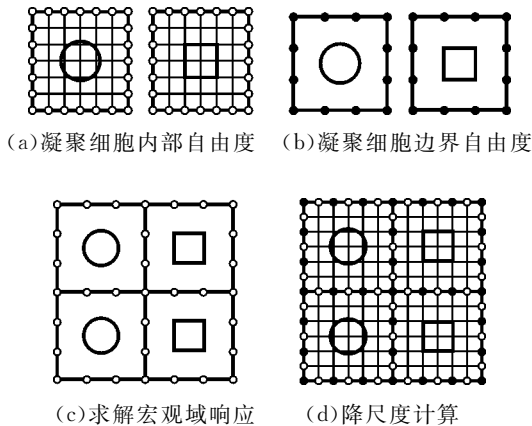


图 2 有限细胞法关键步骤

1.1 凝聚细胞内部自由度

为便于说明,使用双线性四边形单元对细胞进行结构化网格剖分,每个方向均具有 M 个节点,如图 2a 所示。使用常规有限元法组装得到细胞整体刚度矩阵和载荷向量,细胞的平衡方程可以表示为

$$\mathbf{K}_c \mathbf{u}_c = \mathbf{f}_c \quad (1)$$

式中: $\mathbf{K}_c$ 表示细胞的刚度矩阵; $\mathbf{u}_c$ 表示细胞所有节点的自由度; $\mathbf{f}_c$ 表示载荷向量;下标 c 表示细胞。需要说明的是,在建立局部问题(细胞平衡方程)时,无需施加边界条件。对于弹性力学问题 $\mathbf{f}_c$ 是具有 $2M^2$ 个 0 元素的列向量,但对于传热、渗流或润滑等问题, $\mathbf{f}_c$ 不一定是零向量。经过适当的节点编号,式(1)可用矩阵分块表示为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{k}_{bb} & \mathbf{k}_{bi} \\ \mathbf{k}_{ib} & \mathbf{k}_{ii} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_b \\ \mathbf{u}_i \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_b \\ \mathbf{f}_i \end{Bmatrix} \quad (2)$$

式中:下标 b 表示细胞边界; i 表示细胞内部; $\mathbf{u}_b$ 表示细胞边界上的自由度; $\mathbf{u}_i$ 表示细胞内部的自由度。基于消去法对 $\mathbf{u}_i$ 凝聚,式(2)可表示为

$$\bar{\mathbf{K}}_c \mathbf{u}_b = \bar{\mathbf{f}}_c \quad (3)$$

$$\bar{\mathbf{K}}_c = \mathbf{k}_{bb} - \mathbf{k}_{bi} \mathbf{k}_{ii}^{-1} \mathbf{k}_{ib} \quad (4)$$

$$\bar{\mathbf{f}}_b = \mathbf{f}_b - \mathbf{k}_{bi} \mathbf{k}_{ii}^{-1} \mathbf{f}_i \quad (5)$$

由于没有引入边界条件等的假设,经上述凝聚,式(3)和式(1)在数学上完全等价,但待求的单个细胞的自由度从 $2M^2$ 下降至 $8(M-1)$,细胞的等效刚度矩阵 $\bar{\mathbf{K}}_c$ 包含 $64(M-1)^2$ 个元素,且是接近于满阵

的大型稠密矩阵。对于弹性复合材料问题, M 的典型取值范围为 30 至 90, 若取 M 为 50, 则凝聚后的单元刚度矩阵具有 153 664 个非零元素。大量算例表明, 如果直接使用该矩阵进行后续计算会占用大量内存和计算资源, 与 FEM 方法相比, 不但不能减少计算时间, 反而有可能增加计算时间, 这是有限元子结构法无法求解多尺度问题的原因之一。

1.2 凝聚细胞边界自由度

为进一步减小细胞的等效刚度矩阵, 在细胞的 4 条边界上分别选取保留均布的 k 个主节点, 边界上的其余节点定义为从节点, 如图 2b 所示, 节点分类如图 3 所示。若假定主节点的自由度已知, 则从节点的自由度可通过 k 个主节点的自由度插值计算得到。为方便实施, 使用拉格朗日 p 次多项式作为

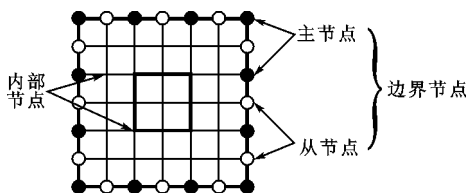


图3 细胞节点分类

插值函数, 其中 $p \leq k-1$ 。例如, 从节点中的第 l 个自由度可由同侧边界上的 $p+1$ 个主节点的对应自由度插值得到

$$u_{sl} = \sum_{j=1}^{p+1} \phi_j u_{mj} \quad (6)$$

式中: 下标 s 表示从节点; m 表示主节点; ϕ_j 表示拉格朗日插值基函数。将式(6)改写为向量形式

$$\begin{aligned} u_{sl} &= \Psi_j^T \cdot U_j \\ \Psi_j &= \{\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots \quad \phi_{p+1}\}^T \\ U_j &= \{u_{m1} \quad u_{m2} \quad \cdots \quad u_{mk}\}^T \end{aligned} \quad (7)$$

通过矩阵叠加, 全体从节点自由度可表示为

$$u_s = T u_m \quad (8)$$

$$T = \sum_{j=1}^4 \Psi_j \quad (9)$$

式中: T 表示插值矩阵。

根据主节点与从节点分类, 式(3)可以用矩阵分块表示为

$$\begin{bmatrix} k_{mm} & k_{ms} \\ k_{sm} & k_{ss} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_m \\ u_s \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_m \\ f_s \end{Bmatrix} \quad (10)$$

将式(8)代入到式(10), 可得

$$\begin{bmatrix} k_{mm} & k_{ms} \\ k_{sm} & k_{ss} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ T \end{bmatrix} u_m = \begin{Bmatrix} f_m \\ f_s \end{Bmatrix} \quad (11)$$

式中: I 表示单位矩阵。式(11)第一行可表示为

$$K_m u_m = f_m \quad (12)$$

$$K_m = k_{mm} + k_{ms} T \quad (13)$$

即细胞的等效刚度矩阵和载荷向量分别可用 K_m 和 f_m 表示。在此凝聚过程中使用主节点的自由度插值计算从节点的自由度, 忽略了部分信息, 计算精度会有所损失, 但通常在细胞边界上的节点的自由度不会产生间断或突变, 当在细胞边界上保留较多的主节点和选取高阶插值函数后, 这时精度损失变得可以忽略。一般来说, 线性和二次插值函数通常误差较大, 当插值函数的阶数高于三次后, 计算误差会显著降低。本文将在数值算例部分详细讨论 FCM 插值方案对计算精度的影响。另一方面, 经过插值近似, 细胞待求的自由度取决于主节点的数量, 即 $8(k-1)$, 对于固体力学问题, 当细胞边界上保留 11 个主节点时, FCM 与 FEM 精细网格间计算结果之间的误差已经低于 1%, 此时细胞的等效刚度矩阵 K_m 为 80×80 稠密矩阵。通过两个凝聚步骤得到规模较小细胞等效刚度矩阵和载荷向量是有限细胞法的关键步骤。对于周期性结构, 细胞的刚度矩阵仅需计算一次, 对于非周期结构细胞刚度矩阵需要分别计算, 但不同细胞的刚度矩阵的计算完全独立, 因此易于并行。

1.3 求解宏观域响应

如图 2c 所示, 宏观域可以认为由有限个细胞组成。在得到的等效细胞刚度矩阵 K_m 和载荷向量 f_m 后, 系统的总体刚度矩阵和载荷向量可表示为

$$K u_m = f \quad (14)$$

$$K = \sum K_m; f = \sum f_m \quad (15)$$

式(15)表示系统总体刚度矩阵由每个细胞的等效刚度矩阵组装而成。施加宏观边界条件后, 式(14)可解, 从而得到宏观域细胞主节点的自由度。

1.4 降尺度计算

对比于传统多尺度方法(均匀化, MsFEM 和 HMM 等), FCM 能很容易地进行降尺度计算, 且可以保证在细胞边界处自由度连续。如图 2d 所示, 在得到主节点的自由度后, 从节点的自由度可由式(8)计算得到, 由此便得到了细胞的边界自由度 u_b , 而细胞内部的自由度为

$$u_i = k_{ii}^{-1} f_i - k_{ii}^{-1} k_{ib} u_b \quad (16)$$

至此整体域精细网格的全部自由度均已求出, 应力和应变等信息可用传统有限元方法计算得到。

从以上推导过程可以看出: 有限细胞法完全基于矩阵变换, 无需引入微观边界, 易于降尺度计算; 同时该方法与控制方程的无关, 因此易于将其推广至非线性结构分析、热分析、地下水渗流等领域。

2 数值算例

本节将以几个典型的算例来验证有限细胞法的计算精度和计算效率等问题,所有计算均在个人台式机上完成(CPU 3.2 GHz, RAM 16G),单核计算,编程语言为 MATLAB 8.3,操作系统为 Windows 7(64 bit)。多尺度精细网格解用 FCM $k \times p$ 表示, k 表示细胞单侧边界上的节点个数, p 表示拉格朗日插值函数的阶次,把传统有限元法精细网格解作为参考解,用 FEM 表示。算例中的所有参数都假设是无量纲量,且本文考察的是平面应力情况。

2.1 算例 1

算例 1 为均质材料悬臂梁结构分析。为了验证 FCM 的正确性,构造一个简单的具有矩形截面的均质悬臂梁算例,如图 4 所示,悬臂梁结构的右端固定支撑,左端承受 $P=100$ 的分布力,悬臂梁长度 $L=100$,高度 $h=10$,宽度为 1,材料的弹性模量为 2×10^5 ,泊松比为 0.3。悬臂梁中性轴挠度的理论表达式为^[19]

$$(v_a)_{y=0} = \frac{Px^3}{6EI} - \frac{PL^2x}{2EI} + \frac{PL^3}{3EI} \tag{17}$$

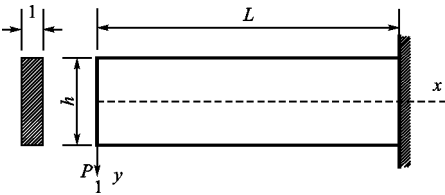


图 4 均质悬臂梁结构示意图

本算例中 FCM 使用了 6×5 的插值方案,即在细胞的每条边界上保留了 6 个主节点,从节点的自由度使用 5 次拉格朗日函数由主节点自由度插值得到。FCM 使用 40×40 的均布双线性四边形单元对细胞进行划分,采用 20×2 的细胞对全域进行划分,故全域细网格尺度共有 $8\,000 \times 800$ 单元,有限元采用相同的细网格密度。通过 L_2 范数^[12]验证数值方法的实际效果

$$L_2 = \left[\frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q \left(\frac{v_i - v_{ref}}{\max |v_{ref}|} \right)^2 \right]^{1/2} \tag{18}$$

式中: Q 为悬臂梁中性轴相应的细网格节点数。本算例中 v_{ref} 取解析解 v_a , 即式(17)。悬臂梁中性轴 y 向位移对比如图 5 所示。由 FCM 和 FEM 的 L_2 范数分别为 3.15×10^{-3} 和 3.35×10^{-3} 可以发现,对于均质材料结构 FCM 在相同的细网格尺度上可以得到比传统 FEM 更高的精度,且收敛于精确解。同时,FCM 的计算时间仅为 FEM 的 26.2%,计算效

率也更高。

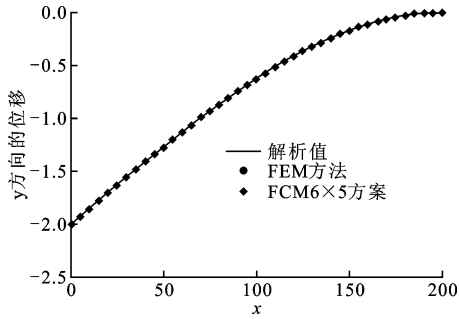


图 5 均质悬臂梁中性轴 y 向位移比较

2.2 算例 2

算例 2 为具有周期结构的非均质悬臂梁结构分析。悬臂梁模型及其边界条件如图 6 所示。该结构由 $A \times B$ 个材料相同的正方形细胞组成,本算例中考虑了 5 种 $A \times B$ 的组合,即 6×2 、 12×3 、 18×7 、 24×13 、 30×29 和 40×30 ,细胞中的边长为 1,包含边长为 0.3 的正方形强化相。其中,基体材料的弹性模量为 2×10^4 ,泊松比为 0.3。强化相的弹性模量为 2×10^5 ,泊松比为 0.25,细胞采用 40×40 的均匀双线性四边形网格划分,如图 7 所示。悬臂梁左端固定,上端承受强度 $q=1$ 的均布载荷。

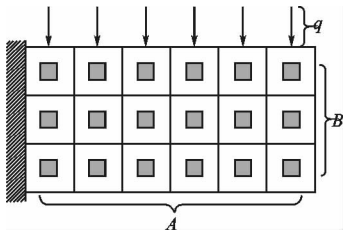


图 6 复合材料结构示意图

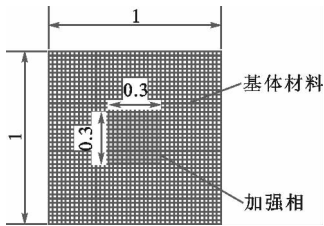


图 7 细胞网格划分

本算例中考虑了 FCM 的两种插值方案,分别为 6×5 和 11×9 ,不同计算规模下,FEM 和 FCM 计算结果的比较如表 1 所示。本算例中取相同网格密度下 FEM 的计算结果作为参考解,当 $A=12$ 、 $B=3$ 时,悬臂梁中性轴 y 向位移对比如图 8 所示。从表 1 可以看出,FCM 和 FEM 的计算结果吻合良好,FCM 6×5 方案的 L_2 范数最大误差为 22.8×10^{-3} ,而 FCM 11×9 方案的 L_2 范数最大误差仅

为 2.43×10^{-3} 。总体看来,FCM 11×9 方案的计算结果优于 FCM 6×5 方案。这是因为在边界上保留更多的主节点和采用高次的插值函数,从而可以更精确地计算从节点的自由度。对于结构分析来说,细胞单侧边界上保留 11 个主节点,FCM 已经具有足够高的精度,保留更多的主节点并不能继续有效提高精度,但会增加计算时间和内存。因此,综合考虑精度和效率,在后续的算例中 FCM 将采用 11×9 的插值方案。

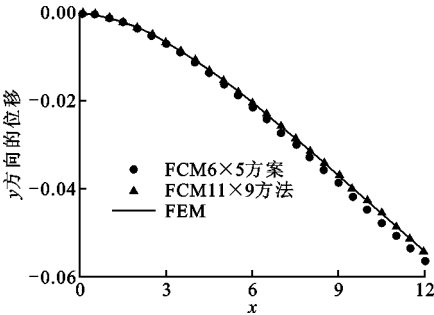


图 8 悬臂梁中性轴 y 向的位移比较($A=12, B=3$)

表 1 不同计算规模下 FEM 和 FCM 计算结果的对比

$A \times B$	总自由度/ 10^3	L_2 范数/ 10^{-3}		计算时间/s		
		FCM 6×5	FCM 11×9	FCM 6×5	FCM 11×9	FEM
6×2	38.4	6.26	2.430	1.98	2.67	3.23
12×3	115	22.80	0.173	2.06	3.49	9.72
18×7	403	11.00	0.308	3.39	3.92	35.10
24×13	998	6.91	0.336	4.51	6.36	118.80
30×29	2 784	4.30	0.409	6.96	15.10	851.00
40×30	3 840	5.54	0.185	7.75	21.10	1 643.50

在计算时间方面,随着总自由度的增加,传统有限元方法的计算时间显著增加,当总自由度达到 380 万时,FEM 的计算时间接近 0.5 h,且内存消耗也接近于物理内存极限(16 GB),因此我们没有尝试更大规模的计算,但在相同的网格密度下 FCM 的计算时间均不足 22 s,内存需求也非常低(小于 1 GB)。这是因为对于周期结构,细胞的刚度矩阵仅需构造一次,且规模较小,故对于周期性结构,有限细胞法可显著降低计算量,节省内存,扩大了计算规模,具有明显的优势。

2.3 算例 3

算例 3 为非完全周期结构的非均质悬臂梁结构分析。悬臂梁由 30×6 个细胞组成,如图 9 所示。细胞的几何尺寸、网格划分、材料性质和结构的边界条件与算例 1 相同,但在竖直方向上,复合材料增强相的边长由 0.1 变化到 0.6,步长为 0.1。

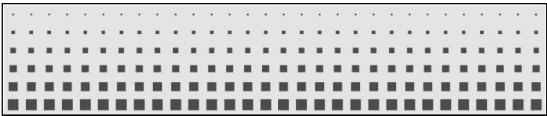


图 9 非均质悬臂梁模型

von Mises 整体应力对比如图 10 所示,细胞微观尺度 von Mises 应力云图如图 11 所示,悬臂梁中性轴 y 向位移比较如图 12 所示,过应力最大点轴线方向 von Mises 应力比较如图 13 所示,发现 FCM

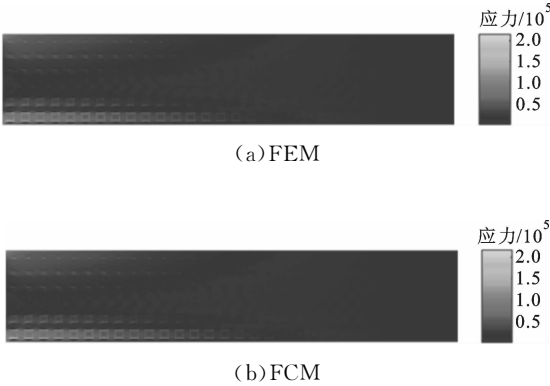


图 10 宏观 von Mises 应力云图比较

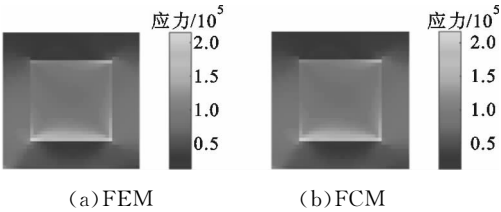


图 11 左下角细胞微观尺度 von Mises 应力云图比较

的计算结果与 FEM 参考解吻合良好。注意到悬臂梁底部增强相尺寸已经接近于细胞尺寸,在这种情况下一些传统多尺度计算方法(均匀化,MsFEM 等)的计算精度会急剧下降,但从图 10 至图 13 可以看到,FCM 与 FEM 的结果依然高度吻合,说明 FCM 具有良好的适应性和灵活性。在计算时间方面,本算例中总自由度为 57.6 万,FEM 的计算时间

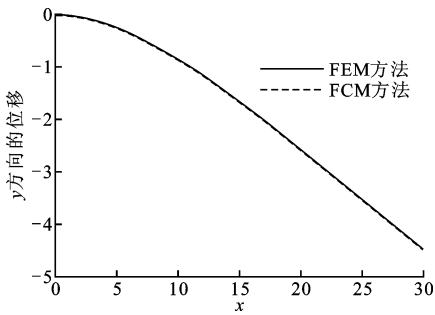
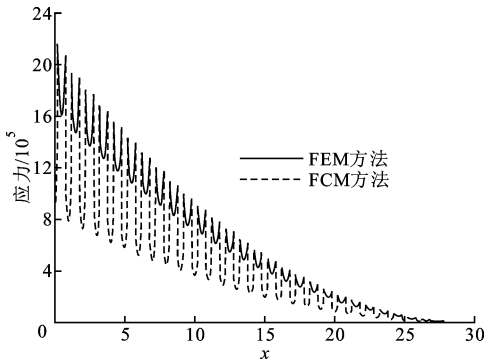
图 12 悬臂梁中性轴 y 方向的位移比较

图 13 过应力最大点轴线方向 von Mises 应力比较

为 50.2 s, 而 FCM 的计算时间仅为 13.3 s, 说明 FCM 在非完全周期情况下依然具有很高的计算精度和较高的计算效率。

若宏观结构没有任何的周期性, 传统有限元方法可能因为计算时间和内存需求过大而无法计算, 但有限细胞法可以将原问题分解为很多小问题后分别求解, 且不同细胞刚度矩阵的构造完全独立, 易于将细胞刚度矩阵的构造进行并行化处理, 且不同线程之间的通信代价极低, 因此 FCM 为分析非均质非周期多尺度材料的力学性能提供了一种方法。

3 结 论

本文介绍了有限细胞法 (FCM) 的基本原理, 详细阐述了该方法的理论基础和关键实施步骤, 展示了其在复合材料结构分析中的应用。FCM 的基本思想是通过矩阵运算直接得到多节点的粗网格 (细胞) 刚度矩阵, 在求解得到粗网格尺度的力学响应后, 通过降尺度计算到全域精细网格尺度的响应。通过数值算例验证有限细胞法的计算精度和计算效率等问题, 结果表明, 相对于传统 FEM, FCM 可显著提高计算效率, 节省内存, 扩大计算规模, 尤其是对于周期材料, 优势非常明显。相对于经典多尺度方法, FCM 在构建局部问题时无需引入微观边界条件, 易于进行降尺度计算, 且具有与控制方程无关、

方便实施等优点。FCM 与控制方程无关的特性决定了其易于推广至多尺度的非线性结构分析、热分析、地下水渗流等领域。

参考文献:

- [1] ROUET-LEDUC B, BARROS K, CIEREN E, et al. Spatial adaptive sampling in multiscale simulation [J]. Computer Physics Communications, 2014, 185 (7): 1857-1864.
- [2] KANOUTÉ P, BOSO D P, CHABOCHE J L, et al. Multiscale methods for composites: a review [J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2009, 16(1): 31-75.
- [3] FISH J, SHEK K, PANDHEERADI M, et al. Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization: theory and practice [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1997, 148(1): 53-73.
- [4] 易垒, 文毅. 惯性载荷作用下火箭橇结构拓扑优化设计 [J]. 应用力学学报, 2013, 30(1): 80-85
- YI Lei, WEN Yi. Topology optimization of rocket sled structure under inertial loads [J]. Chinese Journal of Applied Mechanics, 2013, 30(1): 80-85.
- [5] MIEHE C C B. On multiscale FE analyses of heterogeneous structures: from homogenization to multigrid solvers [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2007, 71(10): 1135-1180.
- [6] ZHANG H W, ZHANG S, BI J Y, et al. Thermo-mechanical analysis of periodic multiphase materials by a multiscale asymptotic homogenization approach [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2007, 69(1): 87-113.
- [7] 张洪武, 张盛, 毕金英. 周期性结构热动力时间空间多尺度分析 [J]. 力学学报, 2006, 38(2): 226-235.
- ZHANG Hongwu, ZHANG Sheng, BI Jinying. Thermodynamic analysis of multiphase periodic structures based on a spatial and temporal multiple scale method [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2006, 38(2): 226-235.
- [8] HOU T Y, WU X H. A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media V. Journal of Computational Physics, 1997, 134(1): 169-189.
- [9] 张洪武, 吴敬凯, 刘辉, 等. 扩展的多尺度有限元法基本原理 [J]. 计算机辅助工程, 2010, 19(2): 3-9
- ZHANG Hongwu, WU Jingkai, LIU Hui, et al. Basic theory of extended multiscale finite element method

(下转第 28 页)