

基于聚类分析的软复合材料降阶均匀化方法*

鞠晓喆 刘金华 梁利华 许杨剑**

(浙江工业大学机械工程学院, 杭州, 310023)

摘要 软复合材料的非均质性和几何非线性导致传统有限元细观分析效率低下, 从而使得宏-细观耦合的多尺度分析在工程实际中并不可行. 为了大幅度提高细观分析的计算效率, 本文结合降阶均匀化技术和聚类分析, 建立一种新型聚类降阶均匀化方法. 首先, 基于有限变形理论, 建立软复合材料的宏-细观双尺度分析框架. 在细观层面上, 利用能量密度函数来描述细观材料相的本构行为. 随后, 结合细观代表性体积单元(RVE)的聚类分析、细观变形梯度场的降阶技术以及高效的采样策略, 基于最小能量原理, 建立聚类降阶模型. 通过聚类分析将 RVE 域划分为若干个均匀子域(簇), 并通过本征正交分解对细观变形梯度场进行低阶近似, 进而大幅减少细观系统自由度数量. 算例结果表明, CROM 方法在保证较高精度的情况下, 虽然离线计算成本较高, 但是在线分析相较于传统有限元计算的加速率高达 10^4 量级. 因此, 该方法适用于宏-细观耦合多尺度分析或多尺度材料参数反演等需频繁调用细观 RVE 预测的问题.

关键词 软复合材料, 降阶均匀化, 聚类分析, 代表性单元体, 有限变形

DOI: 10.19636/j.cnki.cjasm42-1250/o3.2025.004

0 引言

复合材料由于优异的性能在众多工程领域中占据重要地位^[1]. 软复合材料, 诸如填充橡胶^[2]、纳米复合凝胶、双网络水凝胶以及多重网络弹性体, 已在软体机器人^[3]、可穿戴电子设备^[4]、牙科填充物和水凝胶复合材料^[5]等领域中广泛应用. 通过将磁性填料嵌入软聚合物基体中制成一类先进的磁响应柔性复合材料, 能够实现可编程的形状变化, 并且可以通过激光重塑磁各向异性^[6]. 这些特性使得它们在软体机器人、超材料和生物医学设备等多个领域具有广泛的应用前景^[7]. 由于几何和物理非线性以及潜在的细观非均匀性, 针对这些柔性复合材料的力学建模是一项极具挑战性的任务, 目前仍是一个活跃的研究领域. 例如, 最近的研究^[8]提出了一种通用的连续介质损伤模型, 而文献^[9]则涉及不确定性

多尺度方法是一种强大的计算工具, 由细观信

息(即细观形貌和细观组分相的性质)预测宏观尺度的等效行为^[10]. 从细观尺度到宏观尺度的桥接通常被称为均匀化^[11]. 在细观力学中, 均匀化方法的发展最早可追溯到 Eshelby 的开创性工作^[12], 深入研究了嵌入无限基体中的椭圆形夹杂问题. 基于此, 均匀场(解析)方法得以发展, 如 Mori-Tanaka 方法^[13]或自洽方法^[14]等, 仅限于求出相关场量在各材料相中的均值^[15]. 这类方法也能够处理物理非线性问题^[16], 但主要局限于小应变问题. 针对几何非线性问题, 则一般需要采用数值方法. 有限变形下的细观边界值问题通常通过有限元方法(FEM)来求解, 即 FE² 方法^[17,18]. 基于最小化平均增量能原理, 文献^[19]考虑不同细观边界条件, 系统发展了计算宏观应力和切线算子的算法.

数值均匀化方法的主要缺点是计算成本极高, 使得双尺度模拟实际上并不可行. 为了提高计算效率, 学者开发了大量的降阶模型(ROM), 统称为降

* 国家自然科学基金项目(52275164, 12002309)和浙江省自然科学基金项目(LMS25A020002)资助.

2025-03-05 收到修改稿, 2025-03-12 网络首发.

** 通讯作者. E-mail: xuyangjian571@163.com.

阶均匀化方法^[20]. 模型降阶通常通过缩减系统自由度数量的方式,并结合必要的离线分析,于在线阶段寻求计算精度与成本之间的平衡. 针对物理非线性问题,这些方法一般采用本征应变的低阶近似,例如:动态划分^[20]、渐近一致性本征应变场^[21]、本征正交分解(POD)^[22]、变换场分析(TFA)^[23]或非均匀变换场分析(NTFA)^[24-26]等. TFA 采用分段均匀函数对细观塑性场进行近似,以大幅度提高计算效率,但对复杂问题的刚度预测过大. 作为 TFA 方法的扩展,NTFA 充分考虑细观塑性应变场的非均匀性,从而大幅度提升了预测精度. POD 方法则对细观位移场进行本征正交分解,提取降阶基,以缩减在线阶段所求解的自由度数量. 此外,还有学者引入聚类分析,将细观代表性体积单元(RVE)分为多个均匀的子域,例如:自洽聚类分析(SCA)^[27]、虚拟聚类分析(VCA)^[28,29]和聚类非均匀变换场分析(CNTFA)^[30,31]等. 这些聚类方法在降阶模型推导方面有所区别. SCA 通过聚类分析对相应的 Lippmann-Schwinger 方程进行降阶,并提出自洽方法,用于参考材料的自适应选取. VCA 通过无穷远加载和扩展域内忽略边界项,克服了传统方法中周期性假设和参考材料一致性限制,避免了 SCA 中优化参考材料的迭代. 而 CNTFA 则从塑性场增量式拟合的角度提出一个最小化框架,可以方便地嵌入不同的细观本构模型. 通过模型降阶,Fritzen 和 Kunc^[32]进一步建立了一个适用于小变形非线性固体的双级数据驱动均匀化框架.

由于叠加原理不再适用,有限变形问题的模型降阶更具有挑战性. 早期的研究^[22]提出了一种基于本征正交分解(POD)的方法,通过一些预计算来获得细观位移场的低阶近似,从而显著减少了在线求解方程组的维度. 然而,由于基本的矩阵组装步骤仍需执行,计算成本节省仍然有限. 随后,SCA 和 VCA 被相继扩展应用于有限变形问题^[29,33]. 区别于 POD 方法,这类方法涉及参考材料选取、FFT 求解等问题. 最近的研究^[34]基于最小能量原理,从细观变形梯度的 POD 出发,导出了新型降阶均匀化方法. 然而,该方法涉及细观量场的赋值,计算效率仍有较大的提高空间.

针对软复合材料的有限变形问题,本文基于细

观变形梯度场的本征正交分解,引入 RVE 聚类分析,进而建立更加高效的聚类降阶模型(CROM). 首先,建立软复合材料宏-细观建模的一般框架,然后,详细阐述聚类降阶均匀化方法的基本理论和数值实现框架. 在宏观变形梯度空间内,采用高效采样策略,以生成 CROM 所需数据,并生成独立的验证集. 最后,通过算例分析验证聚类降阶模型的有效性.

1 软复合材料的双尺度建模

软复合材料在宏观尺度上呈现出均质材料特性,细观尺度上则由于增强体、基体及材料界面的不同分布,表现出显著的非均匀性. 细观尺度与宏观尺度满足尺度分离条件,即 $l \ll L$ (如图 1, 细观尺度的特征长度 l 远小于宏观特征长度 L), 因此采用一阶均匀化理论.

1.1 双尺度问题的基本提法

如图 1 所示,每一个宏观材料点都与一个细观连续体相关联. 该细观连续体通常通过 RVE 来表示,需要包含足够的细观结构信息^[35].

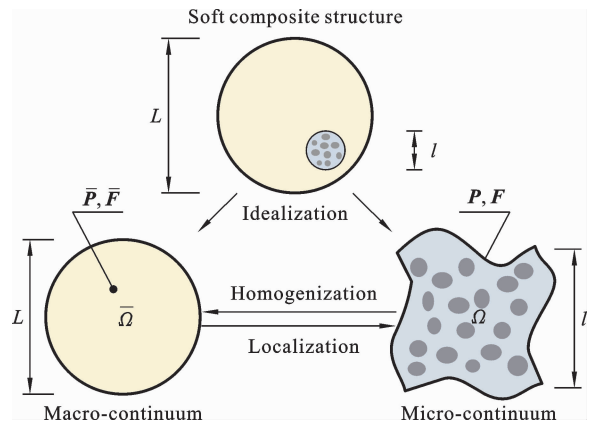


图 1 宏-细观双尺度问题

Fig. 1 Illustration of a two-scale (macro-micro) problem

材料点在宏观尺度下的位移定义为:

$$\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{X}} \quad (1)$$

其中, $\bar{\mathbf{X}}$ 和 $\bar{\mathbf{x}}$ 分别是参考构型和当前构型中的位置矢量. 在有限变形框架下,宏观变形梯度定义为:

$$\bar{\mathbf{F}} = \nabla_{\bar{\mathbf{x}}} \bar{\mathbf{x}} \quad (2)$$

针对参考构型,宏观平衡问题表述为:

$$\text{Div}_{\mathbf{X}}(\bar{\mathbf{P}}) = 0, \quad \bar{\mathbf{F}}^{-1}\bar{\mathbf{P}} = \bar{\mathbf{P}}^T\bar{\mathbf{F}}^{-T}, \quad \text{in } \bar{\Omega} \quad (3a)$$

并满足边界条件:

$$\bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{t}}, \quad \text{on } \bar{\Gamma}_t \quad (3b)$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}^*, \quad \text{on } \bar{\Gamma}_u \quad (3c)$$

其中, $\bar{\mathbf{P}}$ 表示宏观第一类 Piola-Kirchhoff 应力张量, $\bar{\mathbf{t}}$ 代表作用在边界 $\bar{\Gamma}_t$ 上的拉力, 并满足 Neumann 边界条件. $\bar{\mathbf{u}}^*$ 表示 Dirichlet 边界 $\bar{\Gamma}_u$ 上的给定位移. 边界满足: $\bar{\Gamma}_u \cup \bar{\Gamma}_t = \bar{\Gamma}$ 和 $\bar{\Gamma}_u \cap \bar{\Gamma}_t = \emptyset$. 其中, $\bar{\Gamma}$ 表示宏观问题的总边界.

关于参考构型的细观平衡问题则为:

$$\text{Div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{P}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F}^{-1}\mathbf{P} = \mathbf{P}^T\mathbf{F}^{-T}, \quad \text{in } \Omega \quad (4a)$$

$$\langle \mathbf{F} \rangle = \bar{\mathbf{F}} \quad (4b)$$

其中, $\langle \cdot \rangle := \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \cdot \, dv$ 为 RVE 域 Ω 内的体积平均算子, \mathbf{X} 为参考构型的微观位置矢量. 宏-细观能量等效由 Hill-Mandel 条件来保证:

$$\langle \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} \rangle = \langle \mathbf{P} \rangle : \langle \dot{\mathbf{F}} \rangle = \bar{\mathbf{P}} : \dot{\bar{\mathbf{F}}} \quad (5)$$

基于体积平均定理, 有:

$$\bar{\mathbf{P}} = \langle \mathbf{P}(\mathbf{X}) \rangle \quad (6)$$

其中, \mathbf{P} 和 \mathbf{F} 分别为细观 Piola-Kirchhoff 应力和细观位移梯度, 在 RVE 中是非均匀分布的. 在不失一般性的前提下, 我们选用线性位移细观边界条件, 通常给出较为保守的预测, 且便于数值实现^[19].

1.2 本构模型

在细观组分的本构建模方面, 我们考虑一类 Neo-Hooke 型超弹性模型. 该类模型^[36] 由一个能量密度函数 W 来定义:

$$W(\mathbf{F}) := \frac{1}{2}\lambda \ln^2 J + \frac{1}{2}\mu(\mathbf{F} : \mathbf{F} - n_s - 2\ln J) \quad (7)$$

其中, λ 和 μ 为拉梅常数, n_s 为空间维度, J 为变形梯度的行列式. 细观 Piola-Kirchhoff 应力则从能量密度函数中导出:

$$\mathbf{P} := \frac{dW}{d\mathbf{F}} = (\lambda \ln J - \mu)\mathbf{F}^{-T} + \mu\mathbf{F} \quad (8)$$

用于 Newton 求解器的切线算子便为:

$$\mathbb{C} \frac{d\mathbf{P}}{d\mathbf{F}} = \lambda \mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}^{-T} - (\lambda \ln J - \mu)\mathbf{F}^{-T} \otimes \mathbf{F}^{-1} + \mu \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \quad (9)$$

其中, $\mathbf{1}$ 为二阶单位张量, \otimes 表示标准的张量积, 而

$\otimes^{(m,n)}$ 则是修正版张量积, 表示结果中的指标 m 和 n 分别对应于二阶张量的两个指标, 比如: $\mathbf{1} \otimes^{(2,4)} \mathbf{1} := \mathbf{1}_{ik} \mathbf{1}_{jl} e_i \otimes e_j \otimes e_k \otimes e_l$.

2 高效采样策略

微观问题(4)的细观边界条件由宏观变形梯度 $\bar{\mathbf{F}}$ 决定. 然而, $\bar{\mathbf{F}}$ 的定义空间是无限的, 包含所有满足 $J = \det \bar{\mathbf{F}} > 0$ 的二阶张量. 由于计算资源的限制, 本研究需要一种高效的采样策略来实现以下目的:

- (1) 生成用于第 3.2 节中聚类分析的数据;
- (2) 为第 3.3 节中的 Karhunen-Loève 算法生成快照, 以识别降阶基 \mathbf{F}_i^l ;
- (3) 用于验证降阶模型的有效性.

为此, 采用 Kunc 和 Fritzen 提出的采样策略^[34]. 由于拉伸张量的对称性, 平面问题的独立分量由 4 个减少到 3 个, 空间问题则由 9 个减少到 6 个. 该策略源自宏观变形梯度的极分解:

$$\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{U}} \quad (10)$$

其中, $\bar{\mathbf{R}}$ 和 $\bar{\mathbf{U}}$ 分别表示宏观旋转张量 and 对称的宏观拉伸张量. 由于材料客观性, 宏观能量密度泛函必须独立于参考系, 即:

$$\bar{W}(\bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{U}}) = \bar{W}(\bar{\mathbf{U}}) \quad (11)$$

由此导出宏观 Piola-Kirchhoff 应力的变换公式:

$$\bar{\mathbf{P}}(\bar{\mathbf{F}}) = \bar{\mathbf{P}}(\bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{U}}) = \bar{\mathbf{R}}\bar{\mathbf{P}}(\bar{\mathbf{U}}) \quad (12)$$

这就意味着, 仅需针对宏观拉伸张量 $\bar{\mathbf{U}}$ 建立降阶模型. 因此, 采样对象为对称的宏观拉伸张量 $\bar{\mathbf{U}}$, 而非宏观变形梯度 $\bar{\mathbf{F}}$. 针对宏观拉伸张量, 又有如下分解:

$$\bar{\mathbf{U}} = \bar{J}^{\frac{1}{3}} \hat{\bar{\mathbf{U}}} \quad (13)$$

其中, $\hat{\bar{\mathbf{U}}}$ 表示单位模拉伸张量, 且有 $\bar{J} = \det(\bar{\mathbf{U}})$. 基于李群理论^[37], 矩阵指数能够将切空间映射到单位模对称正定矩阵集合. 因此, 对于二维问题, 式(13)化为:

$$\bar{\mathbf{U}} = \bar{J}^{\frac{1}{2}} \exp(\zeta(\alpha\boldsymbol{\gamma}^1 + \beta\boldsymbol{\gamma}^2)) \quad (14)$$

正交基取:

$$\boldsymbol{\gamma}^1 = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (15a)$$

$$\boldsymbol{\gamma}^2 = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (15b)$$

其中, ζ 为幅值, 并均匀取 N_{amp} 个采样点. 此外, $\alpha = \sin\varphi$ 和 $\beta = \cos\varphi$ 取决于在 $\varphi \in [0, 2\pi)$ 范围内的均匀采样, 共设 N_{dir} 个采样点. 此外, 在 $\bar{J}_{min} < 1 < \bar{J}_{max}$ 范围内, 行列式 \bar{J} 采样点总数为 N_{det} . 软复合材料基体一般采用橡胶类不可压缩材料, 因而只需要考虑在 $\bar{J} = 1$ 附近取值, 从而大大减小了采样空间. 体积发生较大变化的情况通常归因于温度变化^[38], 超出了在本文的研究范围. 综上, 采样点的总数为 $N_s = N_{amp} N_{dir} N_{det}$.

3 聚类降阶均匀化方法

数值均匀化方法一般利用 FEM 来直接求解细

观问题的弱形式^[19], 被称为全阶模型(FOM). 细观 RVE 通常需要被离散为大量的有限单元, 从而导致超高的计算复杂度. 为了提高计算效率, 本章提出一种基于聚类分析的新型降阶均匀化方法(CROM). 该方法以细观变形梯度场的 POD 方法^[34] 为出发点, 引入 RVE 聚类分析, 进而建立更加高效的超降阶模型.

3.1 总体框架

如图 2 所示, CROM 建模包括两个主要阶段: 离线阶段和在线阶段, 在 MATLAB 软件平台予以数值实现. 具体思路是, 在离线阶段进行预计算, 以提供在线分析所需的信息, 使得在线阶段只需解决少量方程. 对于给定 RVE, 离线分析只需进行一次. 尽管后续章节将给出各模块的详细描述, 这里先给出总体说明如下:

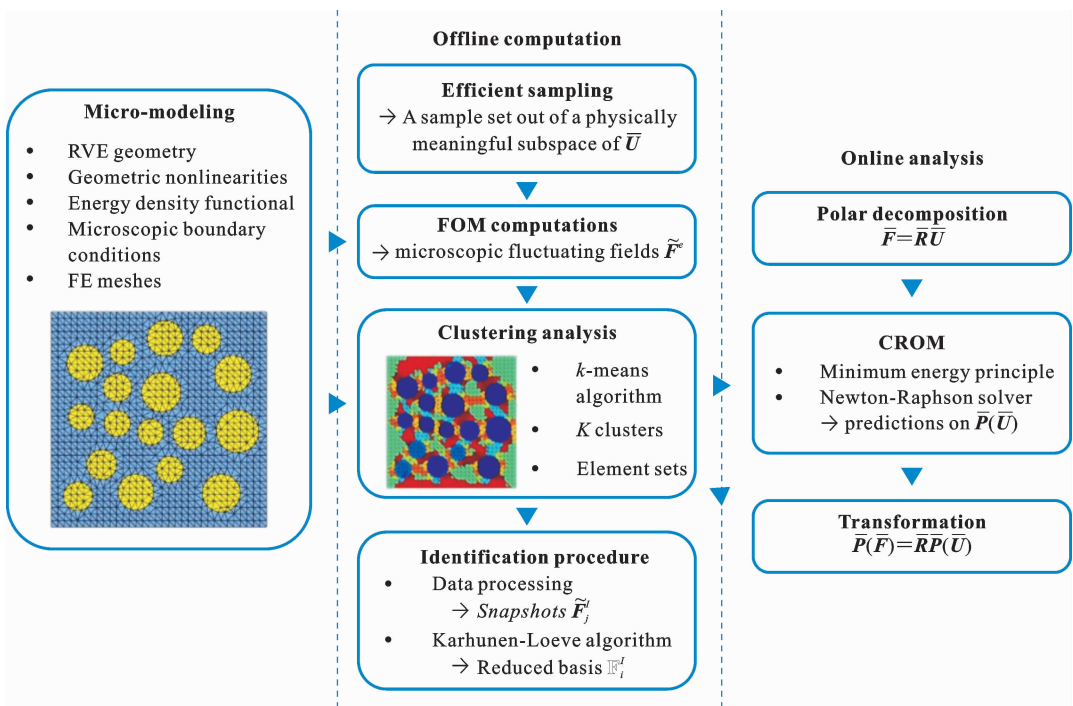


图 2 CROM 的总体建模框架

Fig. 2 Overall framework of the CROM modeling

(1) 由于材料客观性, 只需建立 CROM 来预测由宏观拉伸张量 \bar{U} 引起的宏观应力 $\bar{P}(\bar{U})$. 对于给定的宏观变形梯度 \bar{F} , 首先进行极分解(10); 然后, 将宏观拉伸张量 \bar{U} 传递给 CROM, 后者给出对 $\bar{P}(\bar{U})$ 的预测; 最后, 通过式(12)转换到对 $\bar{P}(\bar{F})$ 的

预测.

(2) 在双尺度背景下, 宏观问题的 Newton 求解器还需要宏观切线刚度算子. 切线算子可以通过解析方法^[34] 或 FE² 方法中常用的扰动法^[17] 来获得.

3.2 RVE 域分解

受均匀变换场分析^[39]和自洽聚类分析^[27]启发,引入聚类分析,将 RVE 域划分为少量的子域(簇).每个簇内的各区域具有最相似的力学响应.因此,进一步假设每个簇是均匀的,并由单一材料相组成.由此,聚类 RVE 中的细观变形梯度场化为:

$$\mathbf{F}^I = \bar{\mathbf{F}} + \tilde{\mathbf{F}}^I, \quad I=1,2,\dots,K \quad (16)$$

其中, $\tilde{\mathbf{F}}$ 表示细观变形梯度的波动部分, K 为簇数.根据式(4b),有:

$$\langle \tilde{\mathbf{F}}^I \rangle = \sum_{I=1}^K c_I \tilde{\mathbf{F}}^I = 0 \quad (17)$$

其中, c_I 表示第 I 个簇的体积分.此外,每一个簇的力学行为与能量密度泛函 W 所描述的所属材料相同.

为了得到合理的簇,必须针对给定 RVE 进行聚类分析.为了节省计算成本,构建一组相同的 FOM 预计算,既用于聚类分析,也用于第 3.3 节中的降阶基识别.利用第 2 章中的采样方法,生成宏观拉伸张量 $\bar{\mathbf{U}}$ 的样本集,其样本总数为 $N_s = N_{\text{amp}} N_{\text{dir}} N_{\text{det}}$.

每个 $\bar{\mathbf{U}}$ 样本定义一个 FOM 计算,且令 $\bar{\mathbf{R}} = \mathbf{1}$,以消除旋转效应.通过 FOM 计算,提取波动场 $\tilde{\mathbf{F}}_j^c$ ($j=1,2,\dots,N_s$).对于平面问题, $\tilde{\mathbf{F}}_j^c$ 有 4 个独立分量.随后,将这些场数据转换为矩阵形式(对于平面问题,每个单元的数据矩阵维度为 $4 \times N_s$),用作 k-means 算法的输入数据.关于 k-means 算法的详细介绍,可以参考文献[40].最终, k-means 算法给出预定数量的簇(单元集).

3.3 降阶基及其识别

根据文献[34],基于本征正交分解构建对细观波动场 $\tilde{\mathbf{F}}^I$ 的低阶近似如下:

$$\mathbf{F}^I \approx \tilde{\mathbf{F}}^I(\xi) = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}^I_i \xi_i \quad (18)$$

其中, \mathbf{F}^I_i 和 ξ_i 分别表示降阶基和相应的活化系数, N 则为降阶基的数量.降阶基 \mathbf{F}^I_i 实际上是波动场 $\tilde{\mathbf{F}}^I$ 的基函数,彼此之间正交,并具有以下性质:

$$\langle \mathbf{F}^I_i \rangle = \sum_{I=1}^K c_I \mathbf{F}^I_i = 0, \quad i=1,2,\dots,N \quad (19)$$

上式由式(18)代入式(17)得到.

为了识别降阶基 \mathbf{F}^I_i ,采用 Karhunen-Loève 算法^[41],其具体流程如下:

(1) 快照提取.调用第 3.2 节中聚类分析的 FOM 计算结果,以获取一些典型的场数据作为快照.通过体积平均运算将有限元场 $\tilde{\mathbf{F}}_j^c$ 化为聚类场 $\tilde{\mathbf{F}}_j^I$,其中 $j=1,2,\dots,N_s$.由此,无需引入额外的 FOM 计算,便可得到 N_s 个快照场.

(2) 通过下式计算协方差矩阵 \mathbf{K} :

$$K_{mn} = K_{nm} = \sum_{I=1}^K c_I \tilde{\mathbf{F}}_m^I : \tilde{\mathbf{F}}_n^I \quad (20)$$

$$(m=1,2,\dots,N_s, n=1,2,\dots,N_s)$$

(3) 求解 \mathbf{K} 的特征值问题,得到特征值 λ_k ($k=1,2,\dots,N_s$),并将其按取值降序排列.预设截断参数 $0 < \alpha < 1$,根据准则 $\sum_{k=1}^N \lambda_k \geq \alpha \sum_{k=1}^{N_s} \lambda_k$ 来筛选特征值.

(4) 构建降阶基:

$$\mathbf{F}^I_i = \sum_{j=1}^{N_s} v_j^i \tilde{\mathbf{F}}_j^I \quad (21)$$

其中, v_j^i 表示第 i 个特征值 λ_i 所对应的特征向量的第 j 个分量.

3.4 CROM 在线分析

在线分析的主要任务是求解降阶基的活化系数 ξ .将式(18)代入式(16),得到细观变形梯度场的近似聚类形式如下:

$$\mathbf{F}^I \approx \mathbf{F}^I_*(\xi) = \bar{\mathbf{F}} + \sum_{i=1}^N \mathbf{F}^I_i \xi_i \quad (22)$$

根据文献[34],将宏观能量密度泛函定义为:

$$\bar{W}(\xi) = \sum_{I=1}^K c_I W(\mathbf{F}^I_*) \quad (23)$$

基于最小能量原理,最优系数通过下述问题获得:

$$\xi^* = \arg \min_{\xi \in \mathbf{R}^N} \bar{W}(\xi) \quad (24)$$

对于给定 $\bar{\mathbf{F}}$,式(24)的一阶最优系数满足:

$$r_i = \frac{\partial \bar{W}}{\partial \xi_i} = \sum_{I=1}^K c_I \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}^I_*} \frac{\partial \mathbf{F}^I_*}{\partial \xi_i} = \sum_{I=1}^K c_I \mathbf{P}^I_* \mathbf{F}^I_i = 0 \quad (25)$$

采用 Newton-Raphson 求解器,从初始猜测值 ξ^0 开始,第 k 次迭代更新如下:

$$\xi^k = \xi^{k-1} - (\underline{\mathbf{D}}^{k-1})^{-1} r^{k-1} \quad (26)$$

其中, Jacobian 矩阵 $\underline{\mathbf{D}}$ 的分量为:

$$D_{ij} = \frac{\partial r_i}{\partial \xi_j} = \sum_{l=1}^K c_l \mathbf{F}_i^l \frac{\partial P_*^l}{\partial \xi_j} = \sum_{l=1}^K c_l \mathbf{F}_i^l \mathbf{C} (F_*^l) \mathbf{F}_i^l \quad (27)$$

针对当前问题,初始猜测 ξ^0 取零,第 4 章的计算都能够 在 5 个迭代步内收敛. 当计算因宏观变形过大而不收敛时,则可以增设子步,并使用上一子步的解作为当前子步的初始值来优化初始猜测.

若满足条件 $|r| \leq TOL$,迭代过程终止. 随后,通过式(18)计算各簇内的细观变形梯度 $\tilde{\mathbf{F}}^l$. 根据细观本构关系(8),确定各簇内的细观应力 $\tilde{\mathbf{P}}^l$. 最后,计算宏观应力:

$$\bar{\mathbf{P}} = \sum_{l=1}^K c_l \mathbf{P}_*^l \quad (28)$$

4 算例分析

本章研究一类代表性软复合材料. 圆形增强体为聚丙烯纤维,在细观层面上呈随机分布. 基体材料为软质聚氨酯. 聚丙烯纤维材质较为柔软,在软质聚氨酯基体中提供适当的增强效果,同时保持一定的柔性. 因而,采用第 2.2 节中的超弹性本构关系来描述各细观相的力学行为,材料参数见表 1. 如图 3 所示,代表性体积单元(RVE)在 FOM 中包含 2182 个线性三角形单元. 其中,增强体所占的总体积分数为 30%. 本章中的计算均在一台配有 Intel(R) Core (TM) i7-13650HX 2.60 GHz 和 NVIDIA GeForce RTX 4060 GPU 的计算机上进行.

表 1 软复合材料的材料属性

Table 1 Material properties of a soft composite

材料	λ (MPa)	μ (MPa)
增强体	1700	740
软基体	155	20

首先,研究 CROM 相较于传统 FOM 在不同聚类数量下预测精度和计算效率方面的表现. 采用第 2 章中的采样策略来生成快照场. 行列式 \bar{J} 在 $[\bar{J}_{\min} = 0.90, \bar{J}_{\max} = 1.10]$ 区间内均匀选取 5 个采样点. 另外,设置 $N_{\text{amp}} = 8$ 个幅值,均匀分布在 $(0, \zeta_{\max} = 0.4]$ 的区间内,并且生成 32 个方向 $N_{\text{dir}} = 32$,均匀分布在 $\varphi \in$

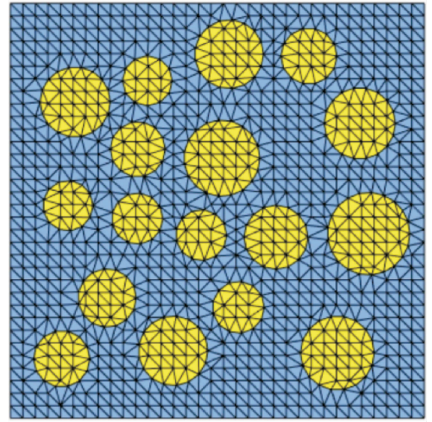


图 3 软复合材料的 RVE 模型

Fig. 3 An RVE for a soft composite

$[0, 2\pi)$ 区间内. 由此,通过 FOM 计算获得 1280 个细观波动场 $\tilde{\mathbf{F}}^e$,计算总时长为 10418 s. 随后,将该场数据输入 k-means 算法,根据给定簇数 K 生成单元集. 图 4 展示了 RVE 的典型聚类示例,共有 100 个簇,其中增强体被分为 10 个簇,基体则被分为 90 个簇.

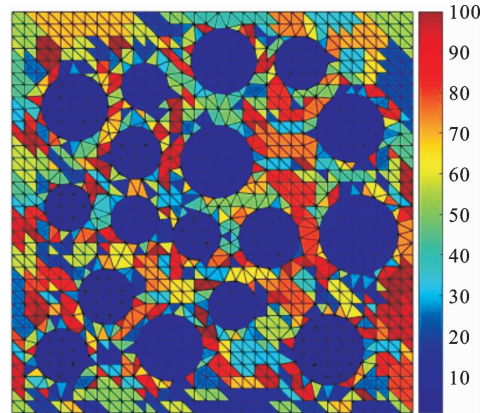


图 4 软复合材料的聚类 RVE 模型($K=100$)

Fig. 4 A clustered RVE for a soft composite ($K=100$)

根据 RVE 聚类结果,对细观波动场 $\tilde{\mathbf{F}}^e$ 逐簇进行体积平均,获得 480 个聚类场快照 $\tilde{\mathbf{F}}^l$,耗时 12.4 s. 设置截断参数为 $\alpha = 99\%$,Karhunen-Loève 算法(第 3.3 节)给出 6 个降阶基,耗时 0.19 s. 离线阶段总计耗时 10430.6 s. 离线计算耗时虽然较长,但要远小于多尺度耦合分析(未降阶)耗时,因而是可以接受的. 这里,提取第 2 个降阶基 \mathbf{F}_2^l 的两个分量,在图 5 中做示例性展示,场量在同一簇内呈均匀分布.

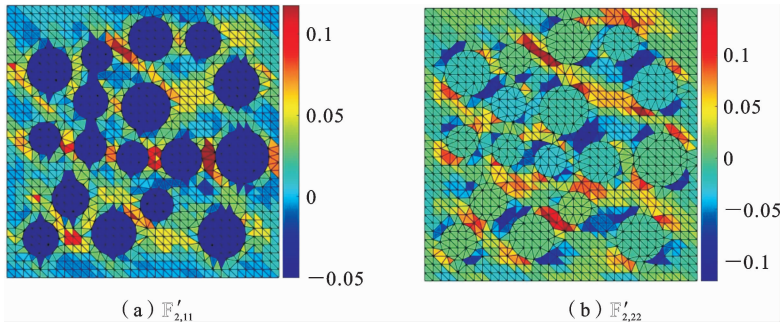


图 5 降阶基 \mathbf{F}_2^I 的不同分量

Fig. 5 Different components of plastic mode \mathbf{F}_2^I

为了开展 CROM 有效性研究,采用第 2 章中的采样策略,额外生成了 2048 个新样本 \bar{U} ,其中, $\zeta_{\max} = 0.4, \bar{J} = [0.90, 1.10], N_{\det} = 4, N_{\text{amp}} = 8$ 和 $N_{\text{dir}} = 64$. 以 FOM 预测结果为参考,定义平均相对范数误差如下:

$$\text{MRNE}_i = \text{mean}_{N_{\text{total}}} \left(\frac{\|\bar{\mathbf{P}}^{\text{FOM}} - \bar{\mathbf{P}}^{\text{CROM}}\|}{\|\bar{\mathbf{P}}^{\text{FOM}}\|} \right) \quad (29)$$

用以评估 CROM 的预测精度,其中 $N_{\text{total}} = 2048$.

如图 6(a) 所示, CROM 随着簇数 K 的增加, MRNE 显著下降. 具体而言,当簇数 K 从 10 增加到 175 时, MRNE 从 8.79% 降至 3.86%, 整体呈现持续下降的趋势. 对于在线阶段,如图 6(b) 所示,随着簇数的增加, CROM 的计算相较于 FOM 的计算时长加速率相应降低,簇数为 $K=10$ 和 $K=175$ 时的加速率分别为 26092 和 2702. 在新样本 \bar{U} 计算

中, FOM 计算因部分不收敛而需要增设子步,加载步数共计为 10539, 而 CROM 未出现不收敛的情况,因而总步数仅为 2048. 这表明,在簇数的选择上需要权衡计算效率和预测精度,以充分满足工程需求. 对于中等数量的簇数 $K=100$, CROM 预测的 MRNE 为 4.80%, 加速率为 4678, 不失为一个不错的折中方案. 当簇数进一步增加到单元 $K=2182$ 时, CROM 变为文献[34]中提出的无聚类降阶模型 (ROM). 如图 6 中的黑色虚线所示, ROM 预测的 MRNE 为 0.09%, 在线加速率仅为 151. 由此可见, 本文所提出的 CROM 更具一般性, 并在预测精度与计算效率的平衡方面提供了更大的灵活性, 且低廉的在线计算成本能够为大型工程问题提供更高效的解决方案.

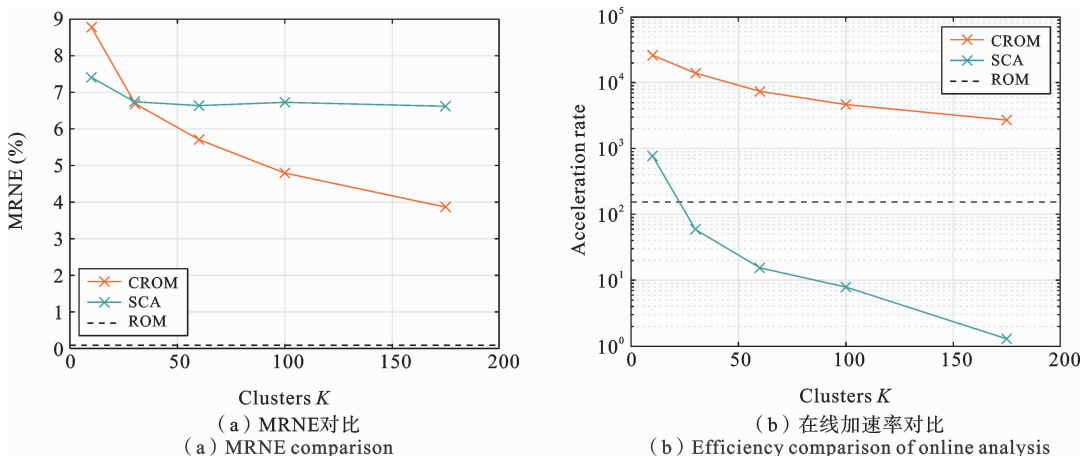


图 6 不同簇数下 CROM, SCA 和 ROM 的精度和效率对比

Fig. 6 Comparison of accuracy and efficiency of CROM, SCA, and ROM under different numbers of clusters

在聚类方法方面,图 6 还提供与 SCA 方法^[27,33]的性能对比. 相应的算例程序由文献[29]所提供的配套代码适配当前问题而来. SCA 方法在理论上基于 Lippmann-Schwinger 方程(引入参考材料)推导而来,在数值实现方面则采用基于像素的 FFT 方法,与本文方法有很大区别. 该方法的离线阶段主要是计算不同簇间的影响矩阵,所需的计算量很少. 如图 6(a)所示,簇数从 10 增加至 175 时,SCA 预测的 MRNE 由 7.41% 降至 6.63%,下降速率较 CROM 慢. 可能的原因在于,在 SCA 数值实现中,采用像素(四边形)来近似 RVE 几何特征,因而在圆形界面的构建上存在一定误差. 由于 SCA 簇数超过 175 时,其在线计算时长接近 FOM 计算,故仅选择簇数在 175 以内的数据进行对比分析. 在离线阶段, CROM 需要通过 FOM 计算生成完整的离线样本集(总离线时长为 10430.6 s),而 SCA 的离线计算时长仅为 16 s. 然而,于在线阶段,如图 6(b)所示, CROM 相比 SCA 展现出更显著的计算效率优势. 因此, CROM 适用于多尺度模拟或多尺度参数反演

分析等需要大量调用 RVE 在线分析的应用场景, SCA 则因其低廉的离线计算成本,在细观分析次数相对较少的情况下占据优势.

作为一个典型示例,图 7 中展现了在变形路径($\alpha=0.5246, \beta=0.8514$, 且 $\bar{J}=1$)和 $\zeta_{\max}=0.8$ 下, CROM、ROM 和 FOM 对应应力分量的预测结果. 对于降阶模型 CROM 和 ROM,分别采用两种不同最大幅值($\zeta_{\max}=0.4$ 和 $\zeta_{\max}=0.8$)的采样数据进行离线分析. 针对 CROM,采用 $\zeta_{\max}=0.8$ 的离线计算时长为 48369 s,是小幅值 $\zeta_{\max}=0.4$ 时的 4.6 倍,但不同幅值对 CROM 的在线计算效率几乎没有影响(主要影响因素为簇数的多少). 以 FOM 为基准,采用小幅值 $\zeta_{\max}=0.4$ 的 CROM 随着 ζ 值增大($\zeta>0.4$),对应应力分量(特别是 \bar{P}_{11})的预测精度急剧下滑. 然而,采用 $\zeta_{\max}=0.8$ 的 CROM($K=300$)在整个变形过程中都能保持较高的预测精度. 因此, CROM 在离线采样阶段需达到与在线预测相当的最大幅值,以确保较高的在线预测精度. 在这方面, ROM 结果支持相同的结论.

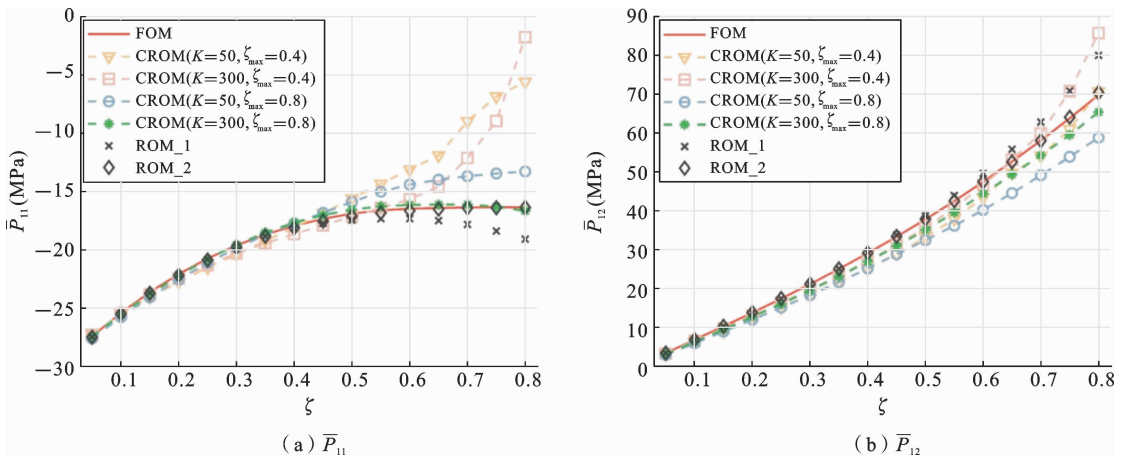


图 7 CROM、ROM 和 FOM 在典型变形路径上的宏观应力预测

Fig. 7 Macroscopic stress predictions of CROM, ROM and FOM along a representative deformation path

另一方面,图 7 还展示了, CROM 的预测精度随簇数 K 的增大而显著增加. CROM($K=300$)的预测精度与 ROM 相近,但相较于 FOM 在线计算效率提升 1640 倍,体现了 CROM 在精度与在线效率间的良好折中.

5 结论

(1) 针对软复合材料的有限变形问题, 本文将文献[34]中的模型降阶技术与 RVE 聚类分析结合起来, 建立了一种新型聚类降阶模型(CROM), 在

预测精度与计算效率的平衡方面提供了更大的灵活性。

(2) 同时, CROM 包含了无聚类 ROM^[34] 作为一个特例(数值实现层面上把每个单元当作一个单独的簇), 因而更具一般性。

(3) CROM 在离线采样阶段需达到与在线预测相当的最大幅值, 以确保较高的在线预测精度。幅值的增大会导致 CROM 离线计算成本的增加, 对其在线计算效率则影响不大。簇数越多, CROM 的预测精度越高, 而计算效率越低。

(4) 当细观非均质性较强、材料相对比度较大时, 为了达到高精度水平, 通常需要相对较多的簇。算例分析结果表明, 在这种极端情况下, CROM 仍然可以在预测精度与计算效率之间提供很好的折中方案。

(5) CROM 方法虽然需要较高的离线分析成本, 但对于宏-细观耦合多尺度分析或多尺度材料参数反演等需要频繁调用细观 RVE 预测的问题, 仍然是可接受的。但在线阶段的计算成本非常低, 相比于传统有限元方法, 其在线加速率可达 10^4 量级。

(6) 虽然 SCA 方法需要很少的离线计算成本, 但相较而言, CROM 无需考虑参考材料的选取问题, 并且在在线分析效率方面占据明显优势。两种方法在理论和数值实现方面都存在较大区别, 各有利弊。针对聚类算法更细致的对比分析(包括 VCA 方法), 有待深入研究。

(7) 由于篇幅限制, 本文仅对新模型在平面数值问题上进行了验证, 为工程应用提供初步参考。未来的研究工作将侧重于该类方法的三维数值实现问题、基于实验数据的模型参数识别以及相关的工程应用推广。

参考文献

- [1] Zimmermann N. A review of failure modes and fracture analysis of aircraft composite materials[J]. *Engineering Failure Analysis*, 2020, 115: 104692.
- [2] Rendek M, Lion A. Amplitude dependence of filler-reinforced rubber: Experiments, constitutive modelling and FEM-Implementation[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2010, 47(21): 2918-2936.
- [3] Boddeti N, Van Truong T, Joseph V S, Stalin T, Calais T, Lee S Y, Dunn M L, Valdivia Y Alvarado P. Optimal soft composites for under-actuated soft robots[J]. *Advanced Materials Technologies*, 2021, 6(8): 2100361.
- [4] Shi Y, Wang C, Yin Y, Li Y, Xing Y, Song J. Functional soft composites as thermal protecting substrates for wearable electronics[J]. *Advanced Functional Materials*, 2019, 29(45): 1905470.
- [5] Agrawal A, Chipara A C, Shamoo Y, Patra P K, Carey B J, Ajayan P M, Chapman W G, Verduzco R. Dynamic self-stiffening in liquid crystal elastomers[J]. *Nature Communications*, 2013, 4(1): 1739.
- [6] Deng H, Sattari K, Xie Y, Liao P, Yan Z, Lin J. Laser reprogramming magnetic anisotropy in soft composites for reconfigurable 3D shaping[J]. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 6325.
- [7] Wu S, Hu W, Ze Q, Sitti M, Zhao R. Multifunctional magnetic soft composites: a review[J]. *Multifunctional Materials*, 2020, 3(4): 042003.
- [8] Zhan L, Wang S, Qu S, Steinmann P, Xiao R. A general continuum damage model for soft composites[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2023, 175: 105290.
- [9] Hamdia K M, Ghasemi H. Quantifying the uncertainties in modeling soft composites via a multiscale approach[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2022, 256: 111959.
- [10] 许杨剑, 武鹏伟, 赵帅, 王效贵, 梁利华. 弹塑性多尺度分析的实现及其在颗粒增强复合材料中的应用[J]. *复合材料学报*, 2017, 34(9): 1934-1943. (Xu Y J, Wu P W, Zhao S, Wang X G, Liang L H. Implementation of elastic-plastic multi-scale analysis and application in particle reinforced composites[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2017, 34(9): 1934-1943. (in Chinese))
- [11] 申川川, 马利, 文安戈, 郭静, 郑津洋. 纤维增强树脂复合材料中的褶皱缺陷: 分散性与虚拟测试[J]. *复合材料学报*, 2022, 39(3): 1332-1342. (Shen C C, Ma L, Wen A G, Guo J, Zheng J Y. Wrinkles in fiber-reinforced resin composites: Heterogeneity and virtual test[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*,

- 2022, 39(3): 1332-1342. (in Chinese))
- [12] Eshelby J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems [J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1957, 241 (1226): 376-396.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] Müller V, Kabel M, Andrä H, Böhlke T. Homogenization of linear elastic properties of short-fiber reinforced composites-A comparison of mean field and voxel-based methods[J]. International Journal of Solids and Structures, 2015, 67: 56-70.
- [16] Sekkate Z, Aboutajeddine A, Seddouki A. Elastoplastic mean-field homogenization: recent advances review[J]. Mechanics of Advanced Materials and Structures, 2022, 29(3): 449-474.
- [17] Feyel F, Chaboche J L. FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials[J]. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2000, 183 (3-4): 309-330.
- [18] Raju K, Tay T-E, Tan V B C. A review of the FE2 method for composites[J]. Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design, 2021, 4 (1): 1-24.
- [19] Miehe C. Computational micro-to-macro transitions for discretized micro-structures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy[J]. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2003, 192(5-6): 559-591.
- [20] Oskay C, Fish J. Eigendeformation-based reduced order homogenization for failure analysis of heterogeneous materials[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2007, 196(7): 1216-1243.
- [21] Chaboche J L, Kruch S, Maire J F, Pottier T. Towards a micromechanics based inelastic and damage modeling of composites[J]. International Journal of Plasticity, 2001, 17(4): 411-439.
- [22] Yvonnet J, He Q-C. The reduced model multiscale method (R3M) for the non-linear homogenization of hyper-elastic media at finite strains[J]. Journal of Computational Physics, 2007, 223(1): 341-368.
- [23] Dvorak G J, Baheieldin Y A, Wafa A M. Implementation of the transformation field analysis for inelastic composite materials [J]. Computational Mechanics, 1994, 14(3): 201-228.
- [24] Michel J C, Suquet P. Nonuniform transformation field analysis[J]. International Journal of Solids and Structures, 2003, 40(25): 6937-6955.
- [25] Ju X, Mahnken R, Xu Y, Liang L, Zhou W. A non-uniform transformation field analysis for composites with strength difference effects in elastoplasticity[J]. International Journal of Solids and Structures, 2021, 228: 111103.
- [26] 鞠晓喆, 朱加文, 梁利华, 许杨剑. 石墨烯纳米复合材料的降阶均匀化方法及其数值实现[J]. 复合材料学报, 2021, 38(12): 4362-4370. (Ju X Z, Zhu J W, Liang L H, Xu Y J. Reduced order homogenization of graphene nanocomposites and its numerical implementation [J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2021, 38(12): 4362-4370. (in Chinese))
- [27] 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.
- [28] Tang S, Zhang L, Liu W K. From virtual clustering analysis to self-consistent clustering analysis: a mathematical study[J]. Computational Mechanics, 2018, 62(6): 1443-1460.
- [29] Yang Y, Zhang L, Tang S. A comparative study of cluster-based methods at finite strain[J]. Acta Mechanica Sinica, 2022, 38(4): 421153.
- [30] Ri J, Hong H, Ri S. Cluster based nonuniform transformation field analysis: An efficient homogenization for inelastic heterogeneous materials[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2021, 122(17): 4458-4485.
- [31] 江祎楠, 陈娟娟, 梁利华, 许杨剑, 鞠晓喆. 碳纤维

- 增强复合材料的聚类非均匀变换场分析[J]. 固体力学学报, 2023, 44(05): 648-658. (Jiang Y N, Chen J J, Liang L H, Xu Y J, Ju X Z. Cluster-Based Non-uniform Transformation Field Analysis of Carbon-Fiber-Reinforced Composites [J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2023, 44(05): 648-658. (in Chinese))
- [32] Fritzen F, Kunc O. Two-stage data-driven homogenization for nonlinear solids using a reduced order model [J]. European Journal of Mechanics-A/Solids, 2018, 69: 201-220.
- [33] Yu C, Kafka O L, Liu W K. Self-consistent clustering analysis for multiscale modeling at finite strains [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2019, 349: 339-359.
- [34] Kunc O, Fritzen F. Finite strain homogenization using a reduced basis and efficient sampling[J]. Mathematical and Computational Applications, 2019, 24(2): 56.
- [35] Hill R. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1963, 11(5): 357-372.
- [36] Bonet J, Wood R D. Nonlinear Continuum Mechanics for Finite Element Analysis[M]. Cambridge university press, 1997.
- [37] Faraut J. Analysis of Lie Groups[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2008.
- [38] Volokh K. Mechanics of Soft Materials[M]. Singapore: Springer, 2016.
- [39] Dvorak G J, Benveniste Y. On transformation strains and uniform fields in multiphase elastic media [J]. Proceedings: Mathematical and Physical Sciences, 1992, 437(1900): 291-310.
- [40] Ahmed M, Seraj R, Islam S M S. The k-means algorithm: A comprehensive survey and performance evaluation [J]. Electronics, 2020, 9(8): 1295.
- [41] 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.

Reduced-Order Homogenization of Soft Composites Based on Clustering Analysis

Xiaozhe Ju Jinhua Liu Lihua Liang Yangjian Xu

(College of Mechanical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou, 310023)

Abstract Soft composites exhibit significant potential in advanced engineering applications but face critical computational challenges due to their inherent heterogeneity and geometric nonlinearity. Traditional meso-scale finite element analysis suffers from low efficiency, rendering macro-meso coupled multiscale analysis impractical for real-world engineering scenarios. To address this limitation, this study develops a clustering-based reduced-order homogenization method that synergistically integrates reduced-order homogenization techniques with clustering analysis, achieving remarkable computational efficiency while maintaining sufficient accuracy. First, we establish a two-scale analysis framework for soft composites on the basis of finite deformation theory. On the meso-scale, an energy density function is used to describe the constitutive behavior of the micro constituents. Then, we perform clustering analysis on the microscale representative volume element (RVE) to partition it into uniform subdomains called clusters. The clustering analysis groups regions with similar mechanical behavior and thereby reduces the system's complexity and related computational cost. After that, proper orthogonal decomposition (POD) is employed to generate reduced bases for approximating the mesoscopic deformation gradient fields. An efficient sampling strategy is used for both snapshot generation and model validation. A clustered version of reduced-order model (CROM) is established based on the principle of minimum energy. Numerical examples demonstrate that the developed CROM can maintain a high level of accuracy while achieving a computational acceleration of about 10^4 compared to traditional finite element methods. A comparison to an existing clustering approach named self-consistent clustering analysis (SCA) is also given. Although the computational cost of the offline phase for the CROM is relatively high, the online analysis is rather fast. This significant improvement in efficiency makes the method highly suitable for problems that require frequent microscale RVE predictions, such as multiscale analysis or multiscale parameter identification. In conclusion, the developed CROM offers a promising and practical tool for engineers, which can be further applied in the design, optimization, and analysis of soft composites.

Key words soft composites, reduced-order homogenization, clustering analysis, representative volume element (RVE), finite deformations