LS-DYNA 基于机器学习-多尺度方法：短纤维-增强复合材料的非线性建模

魏浩言[1*✉], C. T. Wu[1], 胡伟[1], Tung-Huan Su[1],

Hitoshi Oura[2], Masato Nishi[2],

Tadashi Naito[3],

Stan Chung[4], Leo Shen[4]

[1]ANSYS Inc., 7374 Las Positas Rd, 利弗莫尔, 加利福尼亚州, 94551, 美国

[2]JSOL Corporation，地址：日本东京都千代田区九段南1-6-5，九段会馆露台，邮编102-0074

[3]本田技研工业株式会社，地址：日本栃木县芳贺郡芳贺町下高根泽4630，邮编321-3393

[4]CoreTech System Co., Ltd.，地址：台湾新竹县竹北市太原街32号8楼之2，邮编302

*✉ 通讯作者邮箱：*haoyan.wei@ansys.com*

本稿最终版本已发表于《工程力学杂志》

引用本文

*Wei, H., Wu, C. T., Hu, W., Su, T. H., Oura H., Nishi, M., Naito T., Chung S., Shen L.（2023年）。LS-DYNA 基于机器学习的多尺度方法，用于短纤维增强复合材料的非线性建模。《工程力学杂志》。149(3)：04023003。*https://doi.org/10.1061/JENMDT.EMENG-6945

Wei, H., Wu, C. T., Hu, W., Su, T. H., Oura H., Nishi, M., Naito T., Chung S., Shen L.（2023年）。
LS-DYNA 基于机器学习-的多尺度方法，用于非线性建模的短-纤维-增强复合材料。《工程力学杂志》。
149(3)：04023003。https://doi.org/10.1061/JENMDT.EMENG-6945

摘要

短-纤维-增强复合材料（*SFRC*）是适用于汽车和电子行业轻量化结构应用的高性能工程材料。通常，*SFRC*结构采用注射成型制造，这会形成非均质微观结构，而由此产生的非线性各向异性行为难以通过传统微观力学分析进行预测。本文提出了一种基于机器学习-的多尺度方法，将注射成型-诱导的微观结构、材料均匀化和深度材料网络（*DMN*）集成到*LS-DYNA*有限元仿真软件中，用于*SFRC*结构分析。*DMN*是一种嵌入物理知识的机器学习模型，通过离线训练学习复合材料代表性体积单元中隐含的微观尺度材料形态。通过将*DMN*与有限元结合，我们开发了一种精度高、效率高的数据-驱动方法，其预测复合材料及结构非线性行为的计算速度比高-保真直接数值模拟快数个-数量-级。为模拟工业-规模的*SFRC*产品，我们采用迁移学习生成统一的*DMN*数据库，有效捕捉注射成型-诱导的纤维取向和体积分数对整体复合材料性能的影响。本文通过数值算例展示了这种基于*LS-DYNA*机器学习-的多尺度方法在*SFRC*建模方面的良好表现。

关键词： 多尺度方法、降-阶建模、机理机器学习、非线性多尺度仿真、深度材料网络、计算机辅助工程软件、*LS-DYNA*、短-纤维-增强复合材料、注塑-成型热塑性塑料、复合材料结构。

引言

短-纤维-增强复合材料（SFRC），例如玻璃-纤维-增强热塑性塑料，在汽车和电子行业的轻量化结构应用中越来越受到青睐。如今，SFRC 构件通过注塑成型工艺实现大规模-生产，这不可避免地导致聚合物熔体中的纤维分散不均匀，进而使成品中的纤维取向和体积分数因位置而异。非均匀微观结构分布以及各组成材料的不同性能，使 SFRC 呈现出高度复杂、各向异性且非线性的响应（*Mortazavian 和 Fatemi，2015年；Hessman 等，2019年*），因此，要可靠预测复合材料制品的力学行为仍然颇具挑战。唯象各向异性本构模型通常需要经过繁琐的参数拟合过程，才能利用材料数据校准大量模型参数。通过一系列物理实验测量这些材料数据相当耗时-，而且拟合得到的模型参数往往无法适用于材料中不同的微观结构。例如，为低纤维体积分数 SFRC 校准的传统本构模型，即使在纤维取向保持不变的情况下，也无法预测高纤维体积分数 SFRC。为克服这些困难，复合材料多尺度建模方法应运而生，可根据低长度尺度下材料的几何形状和性能，预测较高长度尺度下的宏观材料性能。

目前已开发出多种用于复合材料建模的多尺度方法。其中，解析均匀化方法（*Eshelby and Peierls 1957; Mori andTanaka 1973; Nemat-Nasser and Hori 2013; Li and Wang 2008; Huang 2021*）因简单高效而广受欢迎。例如，通过解析微观力学方法将微观材料信息上推，以获得均匀化短纤维增强复合材料性能，相关研究见*(Müller and Böhlke 2016; Tucker III andLiang 1999*）。然而，解析均匀化方法基于对简化微观结构形态和材料行为的假设，这限制了其在微观结构复杂的复合材料非线性分析中的适用性和准确性。另一方面，计算均匀化方法在复合材料的多尺度设计和建模中日益受到关注 *(Fish et al.2021; Terada et al. 2013*）。对于短纤维增强复合材料，可以通过数值方法重构具有真实纤维分布的代表性体积单元（RVE），并利用直接数值模拟（DNS）方法（如有限元法（FEM）和快速傅里叶变换（FFT））预测多尺度力学响应（*Naili et al.2020; Müller et al. 2015*）。高-保真度直接数值模拟尤其适用于代表性体积单元层级的复合材料设计与分析。为对大-尺度复合材料结构建模，可采用将数值代表性体积单元模型与结构-层级有限元

模型已得到开发。尽管通常采用有限元法对宏观尺度复合材料结构进行离散化，但微观尺度代表性体积单元模型则采用了不同的数值近似方法，由此形成的多尺度方法称为有限元[2] *(Feyel 2003；Feyel 和 Chaboche 2000；Kouznetsova 等 2004；Tan 等 2020)* 或有限元-FFT（*Kochmann 等 2018年；Spahn 等 2014年*）。尽管这些多尺度方法特别适用于高-保真度结构分析，但其在工业规模建模中的应用受到高计算成本的限制 *(Liu 等，2020年；Xu 等，2020年*）。对于纤维分布不均匀的大-规模注塑成型-短纤维增强复合材料结构，采用高-保真度有限元法[2] 或有限元法-FFT模型将消耗极高的CPU时间和内存，难以承受，尤其是在需要进行非线性分析时。

机器学习和数据科学的最新进展为开发先进的数据驱动材料建模和多尺度模拟方法带来了巨大机遇（LeCun et al. 2015；Goodfellow et al. 2016；Liu et al. 2021；Bishara et al. 2022；Vu-Quoc and Humer 2022）。为克服传统本构建模的局限性，人们发展了无模型数据驱动方法。该方法通过构建优化问题，在满足平衡和相容条件等必要物理约束的前提下，直接从表征本构行为的材料数据库中搜索应力解（Kirchdoerfer and Ortiz 2016；Ibanez et al. 2018；Eggersmann et al. 2019；He and Chen 2020；He et al. 2020；He et al. 2021a；He et al. 2021b；Xu et al. 2020）。这种数据驱动计算范式已应用于纤维增强塑料复合材料（Huang et al. 2021）、生物材料（Mora-Macías et al. 2020；Sanz-Herrera et al. 2021）和颗粒材料（Karapiperis et al. 2020）的多尺度建模。然而，由于难以定义能够表征路径相关材料行为的材料数据库，该方法在弹塑性材料建模中的应用仍面临挑战。与此同时，机器学习技术已被用于构建本构定律的代理模型，包括高斯过程建模（Bostanabad et al. 2018；Chen et al. 2018）以及人工神经网络，例如前馈神经网络（Ghaboussi et al. 1991；Fritzen et al. 2019；Le et al. 2015；Lu et al. 2019）、循环神经网络（Ghavamian and Simone 2019；Wang and Sun 2018）和图神经网络/卷积神经网络（Frankel et al. 2019；Vlassis et al. 2020；Rao and Liu 2020）。此外，人们还开发了嵌入材料物理约束的基于神经网络的本构模型，这些约束包括材料坐标系不变性（Ling and Jones et al. 2016）、对称正定性（Xu and Huang et al. 2021）、自洽性（Bonatti and Mohr 2022）和热力学约束（Vlassis and Sun 2021；Masi and Stefanou et al. 2021；He and Chen 2022）。近期，研究人员还探讨了将神经网络与有限元方法和无网格方法相结合，以模拟材料损伤和应变局部化现象（Tao et al. 2022；Baek et al. 2022）。这些研究表明，利用材料数据的机器学习方法在复杂材料物理建模方面表现出色。

为加速多尺度材料建模，人们通过为高保真数值模拟构建代理模型，开发了多种降阶建模方法。沿着这一思路，基于本征正交分解的模型降阶方法见（Kaneko 等，2021年；Rocha 等，2020年；Fritzen 和 Kunc，2018年；Goury 等，2016年；Yvonnet 和 He，2007年）；自洽聚类分析见（Gao 等，2020年；Liu 等，2016年；Liu 等，2018年；Yu 等，2019年）；而一种名为深度材料网络（DMN）的机理机器学习方法由（Liu 等，2019a；Liu 和 Wu，2019年）提出。DMN旨在通过配备基于物理的构建模块的二叉树网络结构，捕捉非线性微观结构相互作用（Liu 等，2019a；Liu 和 Wu，2019年；Gajek 等，2020年）。DMN可在离线阶段进行训练，从线性复合材料数据中学习微观材料形貌及其隐藏的物理规律；之后，训练后的网络便能够对非线性本构行为进行多尺度在线预测。DMN已扩展应用于机织复合材料（Wu 等，2021年）、多孔材料（Nguyen 和 Noels，2022年a；Nguyen 和 Noels，2022年b）、黏聚界面失效（Liu，2020年）以及应变局部化分析（Liu，2021年）。此外，（Liu 等，2019b；Liu 等，2020年；Huang 等，2022年）提出了迁移学习策略，以减少训练工作量，快速构建DMN模型，适用于微观结构形态相似但特征几何形状不同的材料，例如体积分数不同的颗粒增强复合材料。将DMN与有限元耦合用于多尺度结构模拟也已得到研究（Gajek 等，2022年；Gajek 等，2021年；Liu 等，2020年）。尽管取得了显著进展，由于缺乏通用且稳健的软件平台，机理机器学习技术在计算机辅助工程（CAE）中的应用仍局限于学术研究领域。为弥合这一差距，我们为短纤维增强复合材料（SFRC）构建了统一的DMN数据库，覆盖注射成型微观结构的完整范围，并将训练后的DMN模型无缝集成到多物理场仿真软件LS-DYNA中，以实现非线性多尺度建模。

本文的主要目标是介绍用于短纤维增强复合材料非线性建模的 LS-DYNA 基于机器学习的多尺度方法，本文其余部分安排如下。首先，概述深度材料网络的网络架构。接下来，详细介绍将深度材料网络集成到 LS-DYNA 中以进行短纤维增强复合材料建模的方法，包括基于高效迁移学习方案对深度材料网络进行离线训练、基于注塑成型诱导的微观结构快速在线生成新的网络参数，以及通过将训练后的深度材料网络模型与有限元耦合，对短纤维增强复合材料构件进行非线性多尺度预测。最后，通过数值算例展示所提出方法的能力，并给出结论。

深度材料网络概述

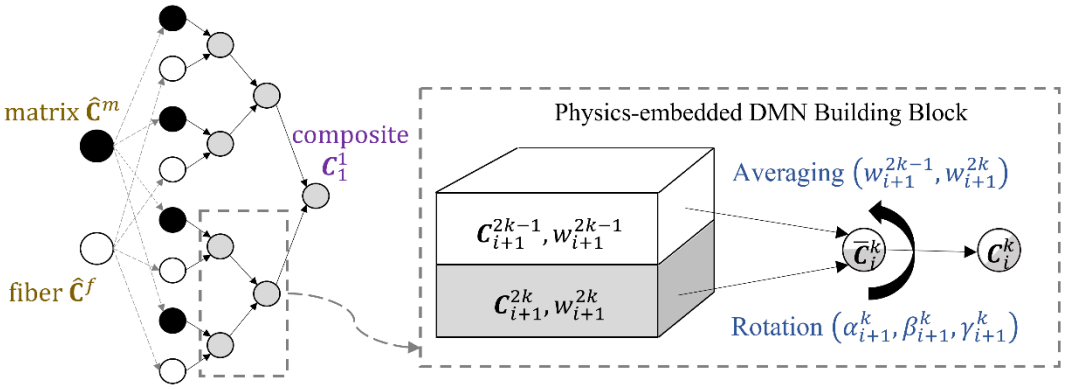


图 1. 4 层深度材料网络（DMN）的架构。

文献（*Liu 等，2019a；Liu 和 Wu，2019年*提出的深度材料网络（DMN）是一种由数据-驱动的多尺度材料建模机理机器学习方法。如图 1 所示，DMN 采用二叉树-网络结构。因此，对于具有 N 层的网络，共有（2^N-1）个节点，其中 2^{N-1} 个节点位于底层 N。对于第 k-层的第 i个节点，定义了四个网络参数，包括一个节点权重 w_i^k 和三个欧拉角 α_i^k， β_i^k以及 γ_i^k，其中 $1 \le i \le N$ 表示层索引，$1 \le k \le 2^{i-1}$ 表示各层内的节点索引。与传统人工神经网络不同，DMN 的所有网络参数都有明确的物理意义，因此可以直接应用混合定则，利用节点权重计算平均应力 $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k$：

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k = \frac{w_{i+1}^{2k-1}}{w_{i+1}^{2k-1}+w_{i+1}^{2k}}\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k-1} + \frac{w_{i+1}^{2k}}{w_{i+1}^{2k-1}+w_{i+1}^{2k}}\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k} \tag{1}$$

其中， $\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k-1}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k}$分别为第$k$层第 i个节点的两个子节点对应的应力， w_{i+1}^{2k-1} 和 w_{i+1}^{2k} 分别为这两个子节点的节点权重。因此，平均材料刚度 $\bar{\boldsymbol{C}}_i^k$ 可表示为其两个子节点的节点权重和材料刚度的函数：

$$\bar{\boldsymbol{C}}_i^k = \boldsymbol{C}_{i+1}^{2k} - \frac{w_{i+1}^{2k-1}}{w_{i+1}^{2k-1}+w_{i+1}^{2k}}\left(\boldsymbol{C}_{i+1}^{2k} - \boldsymbol{C}_{i+1}^{2k-1}\right)\mathbf{A} \tag{2}$$

其中， $\mathbf{A}$ 表示每个深度材料网络构建单元内的应变集中矩阵，该矩阵通过满足两相复合材料的界面平衡和运动学条件而获得（Liu和Wu，2019年）。本文在附录 ***I***中给出了应变集中矩阵解析形式的推导。

除节点权重外，还在网络的每个节点定义欧拉角 α_i^k、 β_i^k 和 γ_i^k ，以捕捉复杂微观结构所导致的方向性材料行为。

对平均刚度和应力施加三维旋转后，可得到以下旋转后的刚度矩阵和应力向量：

$$\boldsymbol{C}_i^k = \boldsymbol{R}^T\left(\alpha_i^k, \beta_i^k, \gamma_i^k\right)\overline{\boldsymbol{C}}_i^k\ \boldsymbol{R}\left(\alpha_i^k, \beta_i^k, \gamma_i^k\right) \tag{3}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_i^k = \boldsymbol{R}\left(\alpha_i^k, \beta_i^k, \gamma_i^k\right)\overline{\boldsymbol{\sigma}}_i^k \tag{4}$$

其中， $\boldsymbol{R}$ 表示基于欧拉角（α_i^k、 β_i^k、 γ_i^k）的旋转矩阵。通过应用

对不同构建块中的物理量（应力、应变、刚度等）进行平均和旋转操作，深度材料网络（DMN）可以将底层的微观基材行为向上扩展，从而预测顶层的宏观复合材料行为。

父节点的节点权重 w_i^k 通过将其两个子节点的权重相加计算得出

$$w_i^k = w_{i+1}^{2k-1} + w_{i+1}^{2k} \tag{5}$$

但底层节点除外，其权重通过修正线性单元（ReLU）激活：

$$w_N^k = Re(z^k) = max(z^k, 0) \tag{6}$$

因此，可以根据激活值 z^k 计算深度材料网络中的所有节点权重。因此，对于具有 N 层的网络，其独立网络的可训练参数为
2^{N-1} z^k 3 $2^N - 1$ α_i^k β_i^k γ_i^k $1 \le i \le$ 个激活
N $1 \le k \le 2^{N-1}$
值和 ( ) 个旋转角 , , and , where , 。通过离线训练确定深度材料网络的可训练参数后，训练好的网络即可学习关键的微观结构相互作用，并用于一般加载条件下非线性复合材料行为的在线预测。

Wei, H., Wu, C. T., Hu, W., Su, T. H., Oura H., Nishi, M., Naito T., Chung S., Shen L. (2023年)。
LS-DYNA 基于机器学习的-用于短-纤维-增强复合材料非线性建模的多尺度方法。《工程力学杂志》。
149(3)：04023003。https://doi.org/10.1061/JENMDT.EMENG-6945

LS-DYNA 基于机器学习的多尺度方法

短纤维增强复合材料深度材料网络的离线训练

将独立网络的可训练参数改写为向量形式 $\boldsymbol{z} \in \mathrm{R}^{2^N-1}$,$\boldsymbol{\alpha} \in \mathrm{R}^{2^N-1}$ ，$\boldsymbol{\beta} \in \mathrm{R}^{2^N-1}$ ，$\boldsymbol{\gamma} \in \mathrm{R}^{2^N-1}$ 后，我们可以表示 N 层深度材料网络中两相复合材料在顶层节点处的整体材料刚度$\boldsymbol{C}_1^1$：

$$\boldsymbol{C}_1^1 = \boldsymbol{f}\left(\widehat{\boldsymbol{C}}^f, \widehat{\boldsymbol{C}}^m, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}\right) \tag{7}$$

其中， $\widehat{\boldsymbol{C}}^f$ 和 $\widehat{\boldsymbol{C}}^m$ 表示短纤维增强复合材料中纤维相和基体相的刚度矩阵。在离线训练过程中，它们被赋予深度材料网络的底层节点，具体如下：

$$\boldsymbol{C}_N^k = \begin{cases} \widehat{\boldsymbol{C}}^f, & \text{if } k \text{ is even} \\ \widehat{\boldsymbol{C}}^m, & \text{if } k \text{ is odd} \end{cases} \tag{8}$$

为了确定网络可训练参数，我们基于均方误差（均方误差）构建了一个优化问题，代价函数由下式给出（Liu和Wu，2019年）：

$$J(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}) = \frac{1}{2N_s}\sum_{j=1}^{N_s} \frac{\left\|\boldsymbol{f}\left(\widehat{\boldsymbol{C}}_j^f, \widehat{\boldsymbol{C}}_j^m, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}\right) - \widehat{\boldsymbol{C}}_j^c\right\|^2}{\left\|\widehat{\boldsymbol{C}}_j^c\right\|^2} + \lambda\left(\sum_{k=1}^{2^{N-1}} Re(z^k) - 2^{N-2}\right)^2 \tag{9}$$

其中，$\|\cdots\|$ 表示弗罗贝尼乌斯范数， λ 是与正则化项相关的正超参数。本研究将其设为 0.001，以确保优化问题的适定性； j 表示材料样本的索引

（在训练数据集中）， N_s 是材料样本总数。因此， $\widehat{\boldsymbol{C}}_j^f$、 $\widehat{\boldsymbol{C}}_j^m$，

$\widehat{\boldsymbol{C}}_j^c$ 分别表示 j^{th}的纤维刚度、基体刚度和复合材料刚度

材料样本的属性，且均视为线弹性材料属性。为使代价函数最小化，我们采用小批量梯度下降算法。由于深度材料网络构建单元中存在解析函数，因此可通过反向传播算法推导代价函数相对于可训练参数 ∇J 的梯度。

深度材料网络（DMN）的离线训练数据，即复合材料的线弹性宏观刚度张量和材料组分的微观刚度张量，可通过实验测量和数值预测两种方式获取。由于缺乏实验数据，本研究采用短纤维增强复合材料的高保真计算均匀化来生成训练数据。为此，重建了代表性体积单元模型

基于短纤维增强复合材料微观结构。在实际应用中，由于纤维取向和纤维体积分数存在多种组合，短纤维增强复合材料产品可能具有非均质微观结构，这取决于注射-成型布局和材料设计。因此，不可能针对每一种微观结构几何形态都重建一个新的短纤维增强复合材料代表性体积单元。为降低深度材料网络训练的成本，我们引入一种迁移学习方案*(Liu 等，2019b；Liu 等，2020；Huang 等，2022)*，通过迁移少量预-训练网络中的知识，快速为新的短纤维增强复合材料微观结构生成深度材料网络。为考虑不同纤维取向状态的影响，我们需要重建3种纤维体积分数相同的短纤维增强复合材料代表性体积单元几何形状，分别具有随机三维、随机二维和单向纤维取向状态。选择这三种特殊取向状态用于离线训练，是因为其对应的二阶取向张量（-*Advani和Tucker三世，1987年*）的线性组合足以对所有其他可能的纤维取向状态进行参数化，详见本文附录***II***。此外，我们还重建了一个具有单向纤维取向状态和较高纤维体积分数的额外代表性体积单元几何形状，以捕捉纤维体积分数对复合材料响应的影响。总之，我们重建了4种纤维长径比约为20的短纤维增强复合材料代表性体积单元几何形状，用于深度材料网络的离线训练，如图2所示。

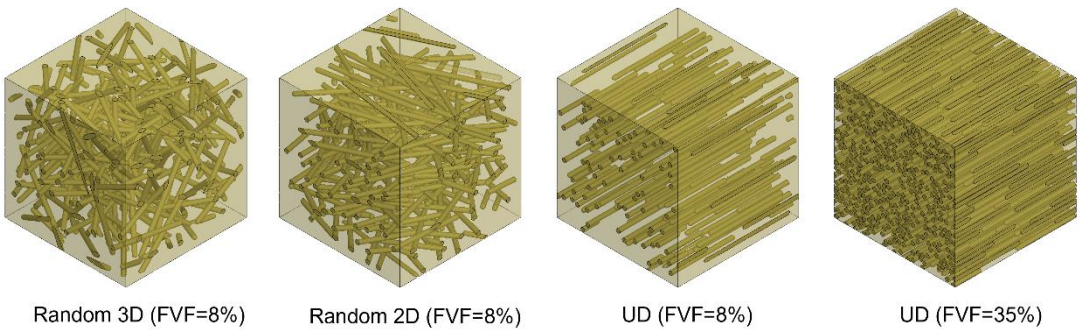


图2。基于迁移学习的深度材料网络模型离线训练所用的短纤维增强复合材料微观结构，其中 FVF 表示纤维体积分数。

对于每种短纤维增强复合材料的微观结构几何形态，我们定义了 500 个材料样本，其中纤维相和基体相具有不同的微观刚度张量，并采用计算均匀化方法获取复合材料相应的宏观刚度张量。为使材料网络学习短纤维增强复合材料的拓扑表征，我们为材料样本赋予具有足够相间对比和材料各向异性的线弹性微观刚度张量（*Liu和Wu，2019年*）。本研究中，每种微观结构均采用 LS-DYNA 中的 10-节点四面体有限元进行离散化，并使用 *RVE_分析_有限元法关键字

为均匀化自动施加周期性位移边界条件（*Wei and Lyu 等，2022年*）。由于离线训练考虑了 4 种微观结构几何形态，因此总共生成了 2000 个线弹性有限元模型。为计算宏观复合材料刚度张量，分别对每个有限元模型施加 6 种正交加载条件。因此，共进行了 12000 次线弹性有限元模拟；每次模拟使用 32 个处理器，总 CPU时间约为 670 小时。

有限元模拟完成后，收集均匀化复合材料刚度以及相应的微观纤维和基体刚度数据，然后将每种 RVE 微观结构几何形态对应的材料数据分为两个数据集，其中 400 个数据点定义为训练数据集，其余 100 个数据点定义为测试数据集。训练数据集用于通过基于梯度的优化，在离线训练阶段计算深度材料网络模型的网络参数；测试数据集则用于评估训练后模型的泛化性能。

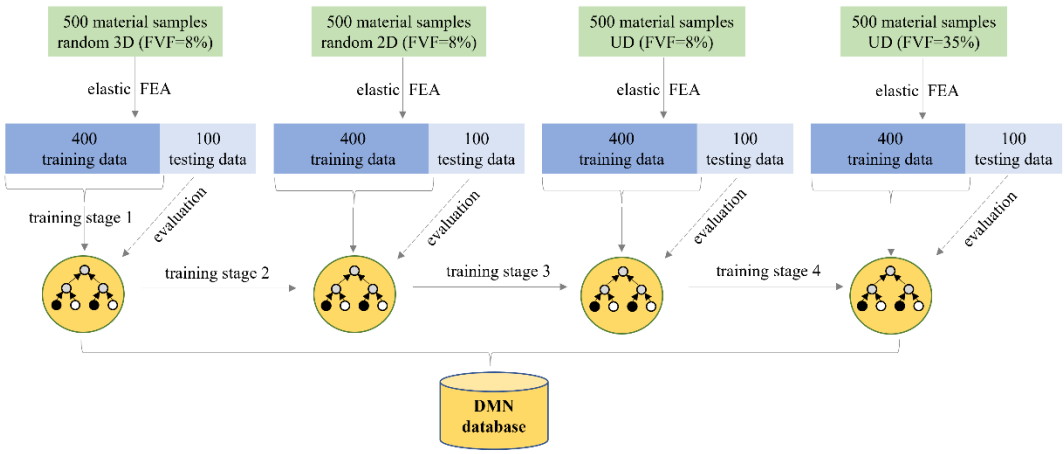


图 3。短纤维增强复合材料深度材料网络四阶段离线训练的工作流程。

基于迁移学习的深度材料网络（DMN）离线训练包括以下四个阶段，如图 3 所示。在阶段 1 中，考虑纤维体积分数为 8%、纤维在三维空间中均匀取向的代表性体积单元（RVE）微观结构，并使用随机初始化的可训练参数训练 DMN。完成该阶段后，我们获得训练后的 DMN 模型，并在阶段 2 和阶段 3 中分别将其用于初始化含 8% 纤维的随机二维 RVE 和单向 RVE 的网络。最后，在阶段 4 中，我们将针对纤维体积分数较低（8%）的单向 RVE 训练得到的网络迁移至纤维体积分数较高（35%）的单向 RVE。对于每个阶段，我们使用 20000 个训练轮次来训练 DMN 模型，其中一个

轮次是指对所有训练样本进行一轮评估。在优化过程中，将每种短纤维增强复合材料微观结构的400个训练样本随机分为10个小批次，因此每轮包含10个训练步骤。此外，每轮结束后，通过将训练误差与其前一轮的值进行比较，采用大胆驱动法调整学习率（即步长的乘数）。离线训练采用10个处理器进行并行计算，完成全部4个训练阶段约需200小时。

离线训练过程中训练误差和测试误差的平均值变化曲线如图4所示，平均误差的定义见（*Liu和Wu，2019年*）。对于具有随机三维微观结构的第一个代表性体积单元，深度材料网络一开始的训练误差较大，因为可训练参数是随机初始化的，且对微观结构没有任何先验知识。对于其余三个代表性体积单元，由于从预-训练网络迁移了知识，训练初始误差要低得多，这表明所采用的迁移学习方案提高了训练效率。

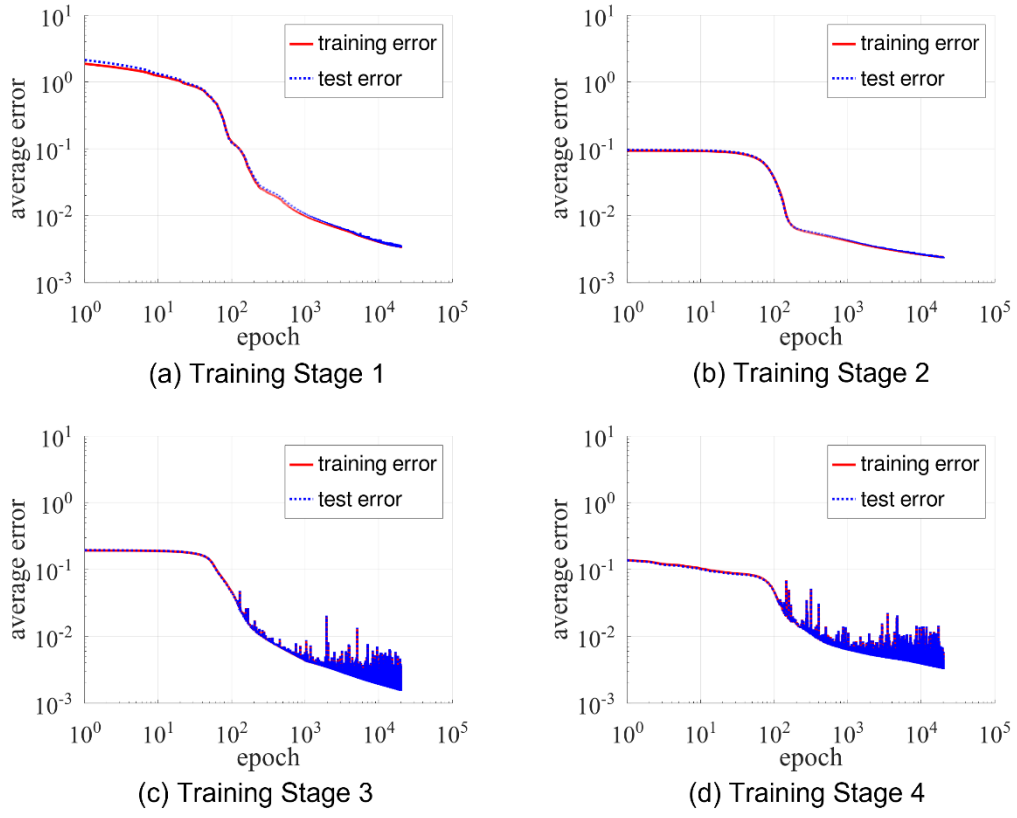


图4。短纤维增强复合材料的深度材料网络模型基于迁移学习的训练过程中，平均训练误差和测试误差的变化曲线。

表1。短纤维增强复合材料微观结构的深度材料网络训练结果

微观结构	随机三维 纤维体积分数=8%	随机二维 纤维体积分数=8%	UD 纤维体积分数=8%	UD 纤维体积分数=35%
训练误差	0.33%	0.23%	0.16%	0.31%
测试误差	0.33%	0.23%	0.15%	0.30%

表1展示了8层深度材料网络（DMN）的训练结果，准确性采用缩放平均绝对误差衡量。从表中可以看出，所有DMN模型的训练误差均小于或等于0.33%。此外，我们可以观察到，训练误差从随机三维纤维取向到随机二维纤维取向逐渐降低，在单向纤维取向状态下则进一步降低。然而，增加纤维体积分数会导致训练误差增大。未见数据点上的测试误差水平与训练误差水平十分接近，表明不存在过拟合问题。DMN强大的泛化性能归因于其双-层构建块中嵌入的基本物理机制，这增强了其对未知材料与载荷空间的外推能力。为了进一步考察训练后的DMN捕捉材料各向异性效应的能力，我们分别采用DNS和DMN预测单向和随机二维短纤维增强复合材料微观结构的均质化线弹性材料刚度，并使用一组训练过程中未见过的纤维和基体性能。按照（*Nordmann等，2018*）所述的方法，根据各向异性刚度计算的方向-相关杨氏模量可视化为三维曲面，如图5所示。DNS与DMN预测结果吻合良好，证实了DMN有效捕捉由微观结构-引起的短纤维增强复合材料性能方向依赖性。

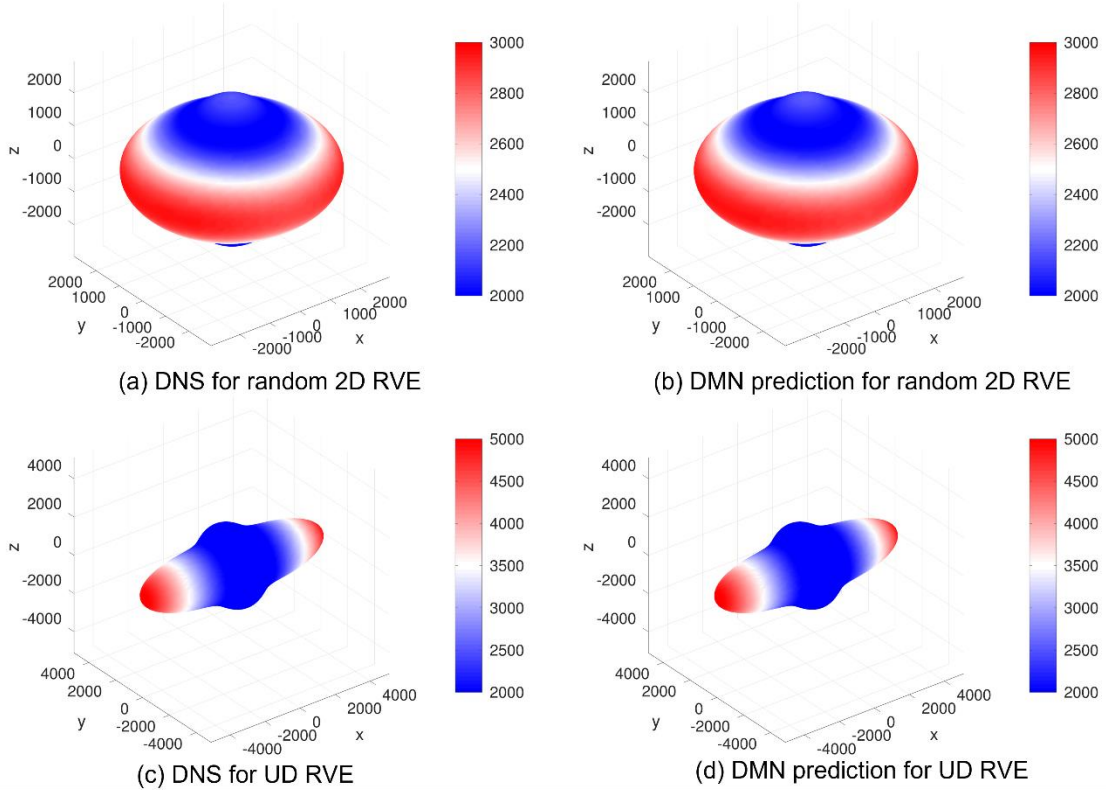


图5。由 DNS 和深度材料网络预测的各向异性短纤维增强复合材料微观结构的杨氏模量三维表示，其中任意方向上的半径（从原点到表面的向量长度）与该方向上的杨氏模量大小成正比；杨氏模量的大小还通过应用于表面的颜色映射来表示。

LS-DYNA 注塑短纤维增强复合材料非线性多尺度在线预测

将短纤维增强复合材料的深度材料网络模型集成到工程仿真软件 LS-DYNA 中，实现对短纤维增强复合材料的多尺度结构分析。在动态有限元分析中，全局短纤维增强复合材料结构的空间域 V 离散为一组子域 V_e，其中 $e = 1, \cdots, N_e$，N_e 表示有限元的总数，全局位移场 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) \in \mathrm{R}^3$ 近似表示为

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t) = \sum_{I=1}^{N_n} \mathrm{N}_I^u(\boldsymbol{X}) \mathbf{U}_I(t) \tag{10}$$

其中，I 表示全局节点索引，N_n 表示有限元网格中的节点总数，$\boldsymbol{X} \in \mathrm{R}^3$ 和 t 分别表示空间位置和时间，$\mathrm{N}_I^u(\boldsymbol{X})$ 和 $\mathbf{U}_I(t) \in \mathrm{R}^3$ 分别表示与节点 I相关的形函数和位移向量。通过求解全局半离散动量方程，可以得到节点位移、速度和加速度：

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} = \mathbf{F}^{\mathrm{ext}} - \mathbf{F}^{\mathrm{int}} \tag{11}$$

其中，$\ddot{\mathbf{U}} \in \mathrm{R}^{3N_n}$ 是全局节点加速度向量，即全局节点位移向量 $\mathbf{U} \in \mathrm{R}^{3N_n}$ 的 2^{nd} 阶物质时间导数，$\mathbf{M} \in \mathrm{R}^{(3N_n)\times(3N_n)}$、$\mathbf{F}^{\mathrm{ext}} \in \mathrm{R}^{3N_n}$和 $\mathbf{F}^{\mathrm{int}} \in \mathrm{R}^{3N_n}$ 分别是集中质量矩阵、全局节点外力向量和全局内部节点力向量。$\mathbf{F}^{\mathrm{int}}$ 由组装与每个节点 相关的所有内力向量 $\mathbf{F}_I^{\mathrm{int}}$ 得到，其定义如下：

$$\mathbf{F}_I^{\mathrm{int}} = \int_V \boldsymbol{\mathcal{B}}_I^T \boldsymbol{\sigma} \, \mathrm{d}V \tag{12}$$

其中，$\boldsymbol{\mathcal{B}}_I$ 表示与节点 I关联的形函数梯度矩阵。式（12）中的内部节点力通过数值积分求得。为了

实现这一目的，在每个积分点 $\boldsymbol{\xi}_q$ 处计算宏观应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 。

有限元模型中，下标 q 表示积分点索引。在当前的 LS-DYNA多尺度方法中，宏观应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 由深度材料网络（DMN）预测

与有限元耦合，其中每个积分点 $\boldsymbol{\xi}_q$ 都关联一个网络

对应局部纤维取向和体积分数。为了对注塑成型的短纤维增强复合材料部件进行建模（其非均匀纤维分布由不同的成型条件所导致，例如零件几何形状、注射浇口位置、充填时间和模具温度），理想的做法是高效地创建在线DMN模型，而不是针对每种微观结构分别进行离线训练。因此，

采用（*Liu 等，2019b*；*Liu 等，2020年*；*Huang 等，2022年*）中提出的迁移学习方法，在在线计算过程中于 LS-DYNA 中创建 DMN 模型。在迁移学习框架下，通过离线训练获得的四个 DMN 模型具有相似的基础拓扑结构，因此可以通过直接插值其可训练参数，在不同网络之间连续迁移。定义一个数据点 ($\boldsymbol{X}^*$， $\boldsymbol{Y}^*$)，其中上标 $*$) 表示中间状态， $\boldsymbol{Y}^*$ 表示未知的 DMN 可训练参数：

$$\boldsymbol{Y}^* = [\boldsymbol{z}^*, \boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\beta}^*, \boldsymbol{\gamma}^*] \tag{13}$$

且 $\boldsymbol{X}^*$ 表示中间短纤维增强复合材料微观结构的几何描述符：

$$\boldsymbol{X}^* = \left[v_f^*, a_{11}^*, a_{22}^*\right] \tag{14}$$

其中， v_f^* 表示纤维体积分数； a_{11}^* 和 a_{22}^* 是两个最大的

特征值，属于二阶纤维取向张量（Advani和Tucker三世，1987年），用于描述短纤维的取向状态。请注意，如附录II所述，任意纤维取向张量 $\boldsymbol{a}$ 的三个特征值 a_{11}、a_{22}和 a_{33} 均满足 $a_{11} \geq a_{22} \geq a_{33}$ 和 $a_{11} + a_{22} + a_{33} = 1$。纤维取向张量和体积分数的数值既可以通过实验测量，也可以通过熔体流动过程的注塑成型模拟预测（Wang 等，2018年）。同样，我们可以将预训练 DMN 模型的已知可训练参数定义为 $\boldsymbol{Y}_1$、 $\boldsymbol{Y}_2$、…、 $\boldsymbol{Y}_N$，并将离线训练中使用的微观结构几何描述符定义为 $\boldsymbol{X}_1$、 $\boldsymbol{X}_2$、…、 $\boldsymbol{X}_N$。相应地，新数据点（$\boldsymbol{X}^*$， $\boldsymbol{Y}^*$）的回归函数可表示为

$$\boldsymbol{Y}^*(\boldsymbol{X}^*) = \boldsymbol{r}\left(\boldsymbol{X}^* \middle| (\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{Y}_1), (\boldsymbol{X}_2, \boldsymbol{Y}_2), \cdots, (\boldsymbol{X}_N, \boldsymbol{Y}_N)\right) \tag{15}$$

为确定具有三个独立几何描述符（即 $\left[v_f^*, a_{11}^*, a_{22}^*\right]$）的线性回归模型中的未知可训练参数（即 $[\boldsymbol{z}^*, \boldsymbol{\alpha}^*, \boldsymbol{\beta}^*, \boldsymbol{\gamma}^*]$）， 我们需要四个线性无关的数据点（$\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{Y}_i$），它们对应于离线训练阶段创建的四种 RVE 几何形状。因此，在式（15）中选择 N=4 。

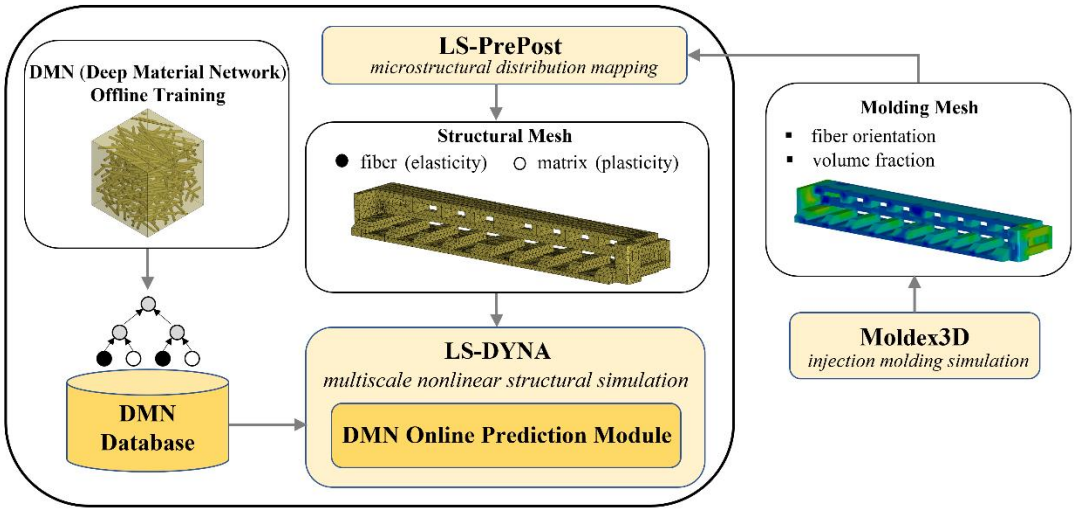


图 6。基于深度材料网络的非线性多尺度仿真框架示意图，适用于短纤维增强复合材料结构。Moldex3D 提供的微观结构数据由 LS-PrePost 映射至与深度材料网络耦合的 LS-DYNA 有限元。

由于在线网络的创建由求积点处的微观结构引导，因此必须获取注射成型-微观结构信息。在实践中，可通过使用 Moldex3D 软件进行注塑成型模拟（*Wang 等人，2018年*），获得短纤维增强复合材料产品中的微观结构分布；预测得到的纤维取向和体积分数数据则可借助前处理软件 LS-DYNA，将成型仿真网格映射至 LS-DYNA 结构仿真网格-，该前处理软件为 LS-PrePost。映射完成后，DMN在线预测模块将在每个求积点处创建一个针对局部微观结构的新 DMN模型，然后将该网络动态耦合至 LS-DYNA 有限元中，以进行非线性多尺度在线预测。整体多尺度仿真框架示意图（*Wei 等人，2021年*）如图 6 所示。请注意，此在线创建 DMN 的过程不涉及代表性体积单元重构或直接数值模拟。此外，新 DMN模型仅在在线预测阶段开始时创建一次，因此其相关计算成本在整体多尺度模拟中可以忽略不计。

创建基于微观结构的DMN模型后，将开展LS-DYNA多尺度结构仿真，其中整体结构的有限元建模与局部复合材料的DMN预测将紧密耦合。在每个时间步，将求解有限元方程，以计算整体结构层面的节点加速度、速度和位移。在本研究中，采用了显式时间积分算法，该算法已被证明具有很高的效率，

适用于涉及接触的非线性动力学问题-冲击和大变形（*Belytschko 等，2014年*）。随后，评估每个积分点处的宏观应变，并将其传递至深度材料网络。利用宏观应变增量，在深度材料网络内执行材料信息的反向去均质化和正向均质化，以预测多尺度材料响应。与深度材料网络的 k^{th} 层 i 节点相关的增量应力-应变关系如下：

$$\Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k = \bar{\boldsymbol{C}}_i^k \Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^k + \mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k \tag{16}$$

其中，$\bar{\boldsymbol{C}}_i^k$ 为平均材料刚度，$\Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^k$ 表示深度材料网络k^{th} 层 i节点的应变增量。在多尺度结构分析中，通过有限元法计算得到的宏观变形率增量被分配给相应积分点处深度材料网络的顶层节点。其他层节点的应变增量通过反向去均质化计算得到。$\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k$ 表示对应力增量的修正；如果忽略复合材料的材料非线性，该修正应为零。然而，在非线性复合材料建模中，$\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k$ 不一定等于零，而是通过从网络较低层开始的前向传播计算得到：

$$\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k = \frac{w_{i+1}^{2k-1}}{w_{i+1}^{2k-1}+w_{i+1}^{2k}}\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k-1} + \frac{w_{i+1}^{2k}}{w_{i+1}^{2k-1}+w_{i+1}^{2k}}\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k} + \boldsymbol{\chi} \tag{17}$$

其中 w_{i+1}^{2k-1} 和 w_{i+1}^{2k} 是相应的节点权重，向量 $\boldsymbol{\chi}$ 取决于两个子节点的材料刚度矩阵和应力修正，其解析表达式见（*Liu和Wu，2019年*）。$\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k-1}$ 和$\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{2k}$ 是子节点的旋转应力修正，通过对平均应力修正应用旋转操作得到：

$$\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_i^j = \boldsymbol{R}\left(\alpha_i^j, \beta_i^j, \gamma_i^j\right)\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^j \tag{18}$$

其中，$\boldsymbol{R}(\alpha_i^j, \beta_i^j, \gamma_i^j)$表示基于网络欧拉角$(\alpha_i^j, \beta_i^j, \gamma_i^j)$的旋转矩阵。在深度材料网络的底层，使用纤维相和基体相的微观本构定律，计算材料刚度矩阵 $\boldsymbol{C}_N^k$、应力增量 $\Delta\boldsymbol{\sigma}_N^k$以及修正量 $\mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_N^k$ 。离线阶段采用线弹性本构定律来学习基本物理机制，而在线结构分析阶段则可采用弹塑性微观本构定律，以捕捉复合材料的非线性行为。对于短纤维增强复合材料，通常采用线弹性定律来模拟纤维相即可；而模拟非线性基体相时，则可采用具有各向同性硬化的弹塑性定律。完成微观材料定律评估后，应力和状态变量（例如等效塑性应变/等效塑性应变）

存储在底层，而刚度矩阵和应力修正则传播到网络的上层。由于材料非线性，应力和应变的正向均质化与反向去均质化在网络中迭代进行。为检查网络迭代的收敛性，在底层计算连续两次迭代应变差值的 L_2 范数：

$$\sum_{k=1}^{2^{N-1}} \left\| \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_N^{k\,(ite+1)} - \Delta\boldsymbol{\varepsilon}_N^{k\,(ite)} \right\| \leq \epsilon_{tol} \tag{19}$$

其中，上标（ite）和（$ite+1$）表示迭代次数，ϵ_{tol} 为收敛容差。达到收敛后，将更新每个底层节点的微观应力和状态变量（例如等效塑性应变），并利用 DMN 顶层节点的应力增量 $\Delta\boldsymbol{\sigma}_1^1$ 更新宏观

应力 $\boldsymbol{\sigma}$，该应力位于有限元的积分点 $\boldsymbol{\xi}_q$ 处：

$$\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{\xi}_q\right)^{t_{n+1}} = \boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{\xi}_q\right)^{t_n} + \Delta\boldsymbol{\sigma}_1^1\left(\boldsymbol{\xi}_q\right) \tag{20}$$

其中，上标 t_n 和 t_{n+1} 表示动量方程时间积分过程中的两个不同时刻。完成基于深度材料网络-的多尺度应力计算后，LS-DYNA 中的有限元将汇集不同求积点处的宏观应力，并通过式（12）计算内力向量 $\mathbf{F}_I^{\text{int}}$，用于非线性有限元分析。计算内力后，即可求解复合材料结构的有限元方程，得到下一个时间步的解。框 1 给出了 LS-DYNA 中基于深度材料网络的内力计算流程图。值得注意的是，除了在非线性有限元建模中应用深度材料网络外，还可以将深度材料网络与无网格方法（*Wang et al. 2009年*；*Wu et al. 2020年*；*Huang et al. 2020年*；*Pasetto et al. 2021年*）耦合，以加速极端变形结构的多尺度分析。

方框 1. 基于深度材料网络的有限元分析内力计算流程图

a. 初始化： $\mathbf{F}^{\text{int}} = \mathbf{0} \in \mathrm{R}^{3N_n}$b. 遍历有限元 $e = 1, \cdots, N_e$i. 收集单元节点位移和速度 ii. 遍历求积点 $\boldsymbol{\xi}_q \in \mathrm{R}^3$ 及其求积权重 $\varpi_q(\boldsymbol{\xi}_q)$ 1. 如果时间 $\mathrm{t}_n = 01$，则初始化深度材料网络（DMN）参数 1.1 导入纤维取向 $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{\xi}_q) \in \mathrm{R}^{3\times3}$、体积分数 $v_f(\boldsymbol{\xi}_q)$ 1.2 基于该点的短纤维增强复合材料微观结构进行基于回归的迁移学习，以获得新的网络参数 $\boldsymbol{z}$, $\boldsymbol{\alpha}$ $\boldsymbol{\beta}$ $\boldsymbol{\gamma}$ $\boldsymbol{w}$ $\boldsymbol{\xi}_q$,,, 在该点

检索存储的 DMN 参数 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{w}$ 如果时间 $\mathrm{t}_n > 02$. 计算宏观变形率增量 $\Delta\mathbf{D}(\boldsymbol{\xi}_q)$ 3. 通过 DMN 计算柯西应力增量 $\Delta\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\xi}_q)$ 3.1 评估微观本构方程，以获得应力 $\Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N^k$、$\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N^k$刚度 $\bar{\boldsymbol{C}}_N^k$以及底层节点的材料状态变量 3.2 对应力 $\mathrm{d}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k$ 和刚度 $\bar{\boldsymbol{C}}_i^k$进行正向均质化 3.3 计算顶层的应力增量 $\Delta\boldsymbol{\sigma}_1^1 = \boldsymbol{C}_1^1 \cdot \Delta\mathbf{D}(\boldsymbol{\xi}_q) + \mathrm{d}\boldsymbol{\sigma}_1^1$
3 4 $\Delta\bar{\boldsymbol{\sigma}}_i^k$ $\Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^k$ 。对应该应力和应变
3 5 3 1
进行反向去均质化。检查网络收敛性。如果未收敛，则转到 。 4. 更新宏观柯西应力 $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\xi}_q) \leftarrow \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\xi}_q) + \Delta\boldsymbol{\sigma}_1^1$5. 更新内部节点力， $\mathbf{F}_I^{\text{int}} \leftarrow \mathbf{F}_I^{\text{int}} + \boldsymbol{\mathcal{B}}_I^T(\boldsymbol{\xi}_q)\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\xi}_q)\varpi_q(\boldsymbol{\xi}_q)$ iii. 将 $\mathbf{F}_I^{\text{int}}$ 组装到全局内部节点力向量 $\mathbf{F}^{\text{int}}$iv. 结束求积点循环 c. 结束有限元循环

短纤维增强复合材料非线性建模的应用

本节给出两个数值算例，以展示本文所提出的基于DMN的多尺度方法的有效性和性能。在第一个算例中，我们通过与代表性体积单元的直接数值模拟进行比较，验证该方法的准确性和效率；其中，微观结构几何形态和非线性微观材料本构关系均未在DMN离线训练中出现。在第二个算例中，我们将注射成型所诱导的纤维取向和体积分数纳入分析，对一个短纤维增强热塑性塑料部件进行非线性多尺度分析，从而展示本文所提出的方法在必须捕捉微观结构效应的工业应用中的能力。

与短纤维增强复合材料代表性体积单元的直接数值模拟进行验证

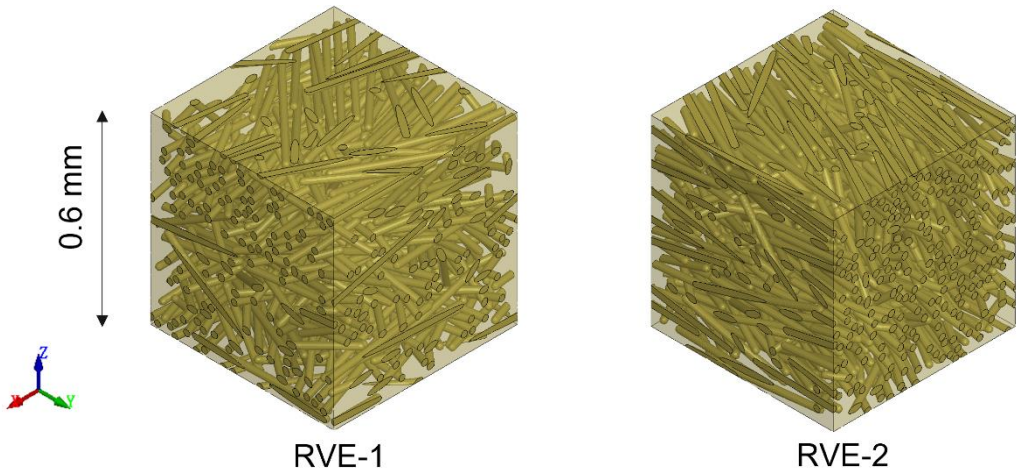


图 7。用于直接数值模拟的短纤维增强复合材料微观结构重构结果。

表 2。在线预测中分析的短纤维增强复合材料微观结构

SFRC RVE	纤维取向张量						纤维体积分数
	a_{xx}	a_{yy}	a_{zz}	a_{xy}	a_{yz}	a_{zx}	
1	0.5861	0.3521	0.0618	0.05447	-0.0172	-0.0159	19.4%
2	0.1353	0.8036	0.0611	0.1504	-0.009521	-0.005788	24.0%

在本示例中，我们展示了在单个宏观材料点层面针对不同短纤维增强复合材料微观结构的深度材料网络非线性在线预测结果。所分析的两个

图7展示了短纤维增强复合材料微观结构，表2根据注塑成型的短纤维增强复合材料部件中观察到的典型微观结构，列出了纤维取向和体积分数。对于热塑性塑料，采用带有分段线性硬化定律的非线性各向同性弹塑性材料模型；对于玻璃纤维，则采用各向同性线弹性材料模型。材料属性见表3。DMN离线训练阶段未涉及这些微观结构和非线性微观材料模型。

表3。代表性体积单元仿真所用短纤维增强复合材料组分的材料属性

	基体相	纤维相
杨氏模量	1616 MPa	72000 MPa
泊松比	0.3545	0.20
初始拉伸屈服强度	0.63 MPa	---
质量密度	1.0×10^{-9} 吨/mm^3	2.54×10^{-9} 吨/mm^3

Table 4. 短纤维增强复合材料代表性体积单元直接数值模拟所采用的高保真有限元离散化

	代表性体积单元 1	代表性体积单元 2
单元数量	4450825	5047295
自由度数量	18226953	20622111

作为对比，我们在 LS-Dyna 中对代表性体积单元模型进行了直接数值模拟。代表性体积单元的尺寸设为约为纤维长度平均值的 1.3 倍，并采用 10节点四面体有限元以实现高保真离散化，单元数量和位移自由度（自由度）数量汇总于表4。通过在有限元模型上施加周期性位移边界条件，施加无约束单轴拉伸载荷。进行非线性隐式计算，并通过计算均匀化获得宏观应力-应变结果。如图8和图9所示，复合材料中基体相出现局部塑性，纤维相出现集中应力，从而呈现出高度非线性的弹塑性行为。在

此外，不同的微观结构几何形态会导致复合材料产生不同的响应。

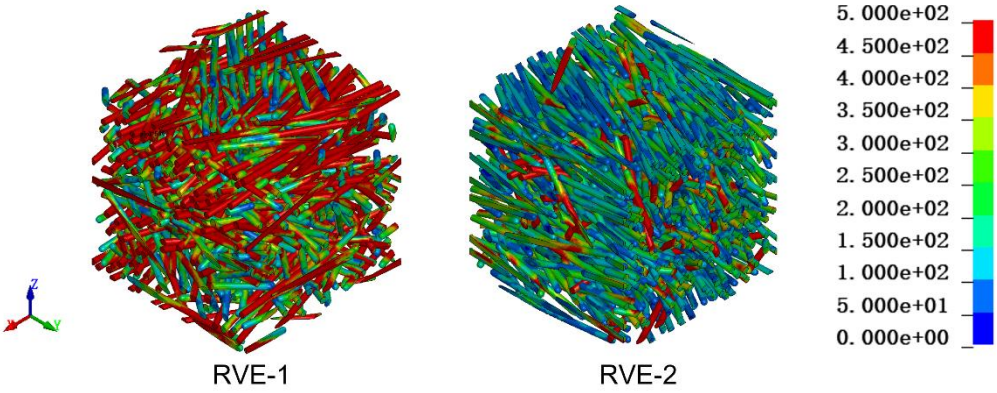


图8. DNS预测的SFRC纤维相中的冯·米塞斯应力（绘制于未变形的代表性体积单元构型上）。

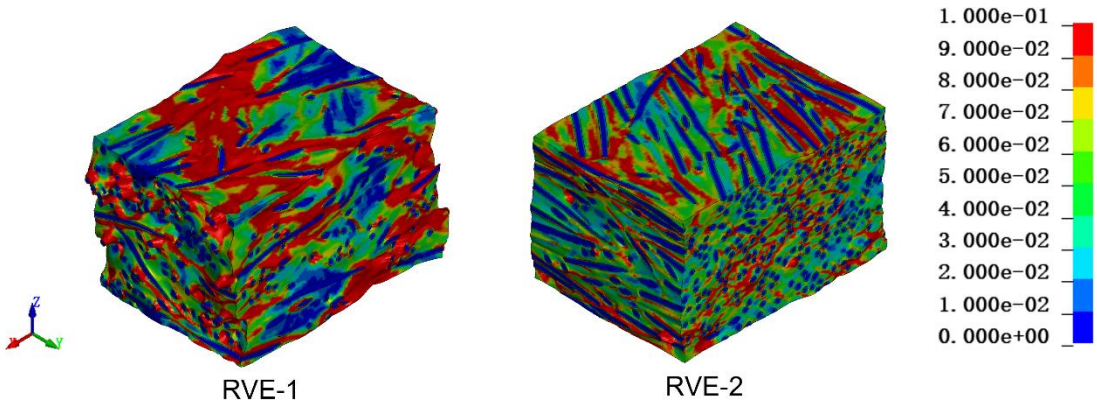


图9. DNS预测的SFRC基体相中的等效塑性应变（绘制于变形后的代表性体积单元构型上，变形比例因子为5.0）。

对于基于深度材料网络的在线预测，将单个实体有限元与深度材料网络耦合，并分别考虑代表性体积单元 1 和代表性体积单元 2 的纤维取向张量及体积分数，通过迁移学习生成网络参数。在在线阶段形成新的深度材料网络后，将直接数值模拟预测的宏观应变张量施加于网络的顶层节点，从而确保直接数值模拟与相应深度材料网络模拟具有一致的宏观拉伸变形状态。

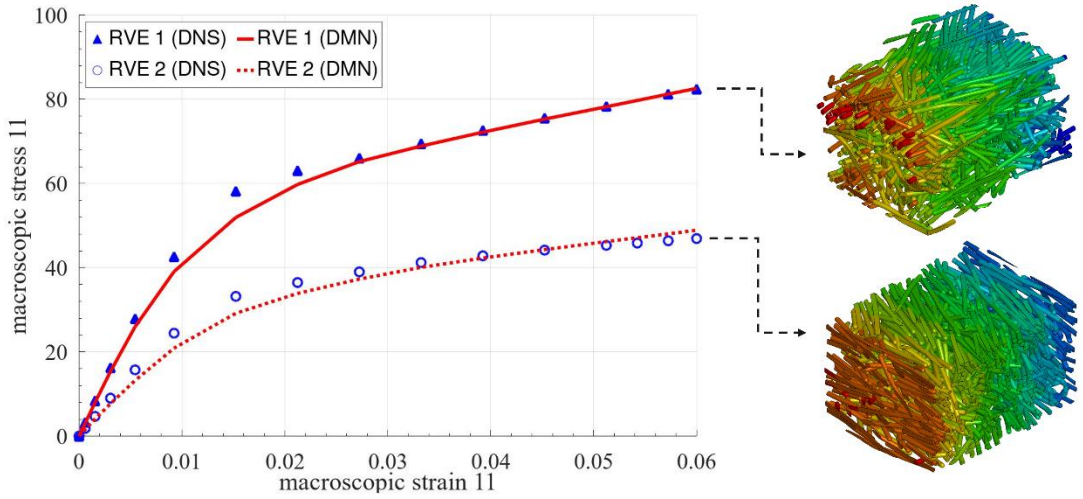


图10。深度材料网络和直接数值模拟预测的短纤维增强复合材料代表性体积单元宏观应力-应变曲线，以及变形后代表性体积单元对应的位移场（使用5.0的比例因子显示变形后的构型）。

图10绘出了深度材料网络和直接数值模拟预测的宏观应力-应变曲线。可以看出，深度材料网络能够很好地捕捉复杂短纤维增强复合材料微观结构对复合材料整体弹塑性材料行为的影响。具体而言，沿拉伸加载方向，代表性体积单元1的力学响应比代表性体积单元2更硬，这一特征可由对微观结构敏感的深度材料网络自然预测。总体而言，基于深度材料网络的非线性预测结果与基于有限元法的高保真直接数值模拟结果吻合良好。值得一提的是，由于高纤维体积分数代表性体积单元的网格生成颇具挑战，直接数值模拟通常难以应用于短纤维增强复合材料代表性体积单元；此外，强非线性和网格畸变有时也会导致有限元模拟出现数值收敛问题。所提出的基于深度材料网络的多尺度建模方法能够自然地规避所有这些问题。

表5。短纤维增强复合材料代表性体积单元建模中深度材料网络和直接数值模拟的总CPU时间

	代表性体积单元1	代表性体积单元2
DNS（64个核心）	32.25 小时	40.38 小时
DMN（1 个核心）	1 秒	1 秒

表5总结了用于SFRC代表性体积单元建模的深度材料网络和直接数值模拟的计算成本。可以看出，使用深度材料网络在单核上进行预测，比基于有限元的直接数值模拟在64核上快100~150 千倍。直接数值模拟的计算负担主要来自求解有限元方程组：每个代表性体积单元模型约有2000万个自由度，尽管使用了并行迭代方程求解器，仍会消耗大量CPU时间和内存。此外，每个代表性体积单元的有限元模型约包含2000万个积分点，在每个时间步都必须评估这些积分点处的材料定律，这进一步拖慢了计算。相比之下，深度材料网络的计算成本主要与底层节点处的材料定律评估有关。对于一个8层网络，底层仅有128个节点，因此其计算速度比基于有限元法的直接数值模拟快几个数量级。在直接数值模拟中，代表性体积单元模型的非线性变形偶尔会导致有限元形状扭曲，从而在隐式分析过程中造成收敛困难。在这种情况下，必须减小直接数值模拟的载荷步长并增加迭代次数。另一方面，由于网络迭代算法能够自然避免网格缠结，深度材料网络模拟可以实现令人满意的收敛。

显然，深度材料网络可视为高保真直接数值模拟模型的一种有效且稳健的降阶模型。如前一节所述，在线弹性训练数据的生成和网络参数的优化过程中，离线训练阶段会产生一定的计算成本。尽管如此，离线训练完成后，训练好的 DMN 模型便可与有限元法集成，用于在线预测，从而显著加快非线性多尺度仿真。

注塑成型汽车部件的非线性多尺度仿真

本例展示了将本文提出的 LS-DYNA 基于机器学习的多尺度方法应用于钢纤维增强混凝土构件非线性动态仿真的工业案例。如图11所示，我们对一个动态冲击接触过程进行建模：一件汽车零件以 40 m/s 的初速度撞向一根刚性杆。为此，我们生成了一个包含 175509 个节点和 682452 个单元的有限元网格（钢纤维增强混凝土构件由 682452 个四面体实体单元构成，刚性杆由 2200 个壳单元构成）。

为在 LS-DYNA 多尺度结构模拟中初始化 DMN模型，必须获得注射成型导致的短纤维增强复合材料部件的微观结构分布。为此，使用 Moldex3D 软件对充填、保压和冷却过程进行注塑成型模拟。图12展示了注射成型设置及用于模塑模拟的数值模型，其中包含1058868个有限体积单元和472501个节点。通常，成型网格与结构网格并不相同，因为流体和固体的离散化需要考虑不同因素，

分别。例如，如图12(b)所示，为准确捕捉熔体流入，成型网格需要在注射浇口附近进行局部细化离散化。图13绘出了预测的纤维取向张量分布，显示纤维排列具有很强的位置依赖性。此外，尽管预测的纤维体积分数约为18%，但在两个注射浇口附近可以清楚地看到纤维浓度并不均匀。随后，使用前处理软件 LS-PrePost，将图12(b)所示成型网格上的非均匀微观结构分布映射到图11(b)所示的结构网格上。根据迁移学习策略，映射后的数据用于指导创建新的深度材料网络模型，使其适用于结构网格每个积分点处的局部纤维取向和体积分数。

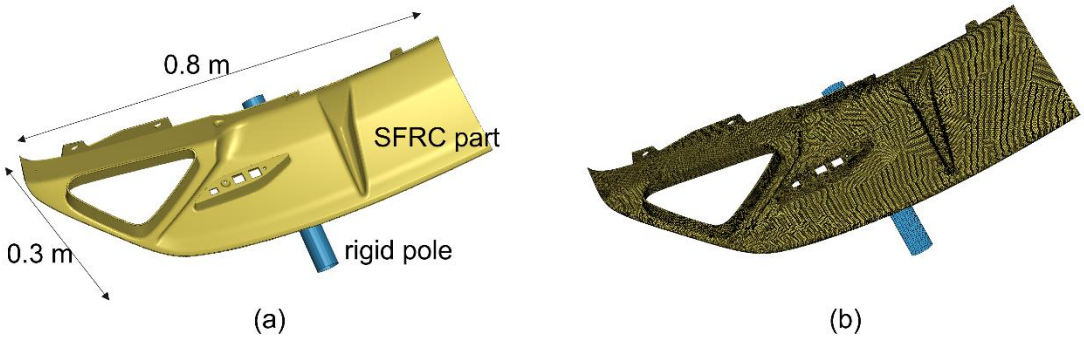


图11。 由 注射成型 短纤维增强热塑性复合材料制成的汽车零件。 (a) 短纤维增强复合材料零件与刚性杆的几何形状。 (b) 非线性多尺度结构模拟中使用的实体有限元网格。

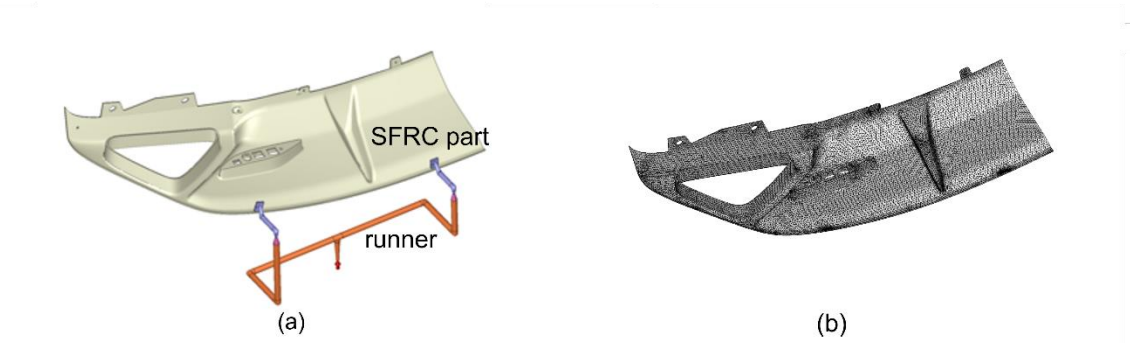


图12。 由 注射成型 短纤维增强热塑性复合材料制成的汽车零件。 (a) 短纤维增强复合材料零件与注射成型热流道的几何形状。 (b) 注塑成型模拟中使用的实体有限体积网格。

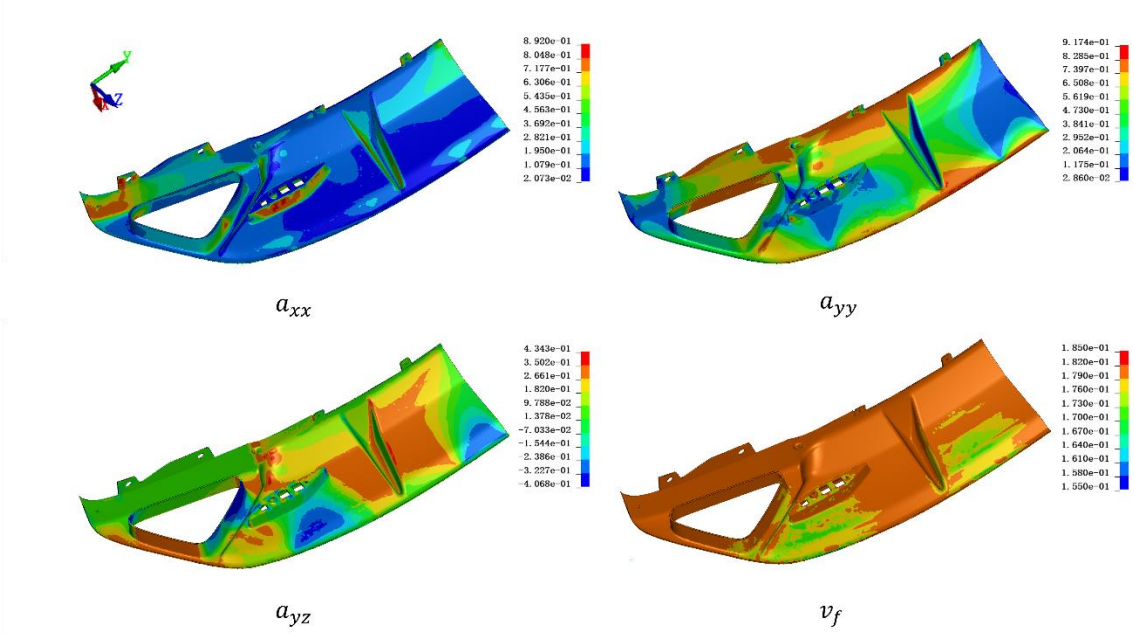


图 13. 注塑成型模拟预测的制造工艺诱导 微观结构分布，其中绘制了纤维取向张量分量 a_{xx}、 a_{yy}、 a_{yz} 和纤维体积分数 v_f 。

表 6 . 汽车零部件模拟所用短纤维增强复合材料组分的材料属性

	基体相	纤维相
杨氏模量	3800 MPa	80000 MPa
泊松比	0.39	0.20

在多尺度结构分析中，我们对纤维采用弹性模型，对基体相采用非线性塑性模型，其弹性常数列于表 6。为描述基体的弹塑性行为，我们采用以下具有各向同性硬化的冯·米塞斯屈服函数：

$$s_Y^m = s_1^m + s_2^m \cdot \bar{\varepsilon}_P^m - s_3^m \cdot \exp(-h_0^m \cdot \bar{\varepsilon}_P^m)$$

其中， s_Y^m 表示基体相的屈服强度， $\bar{\varepsilon}_P^m$ 表示基体材料累积的等效塑性应变，并选取塑性屈服参数 h_0^m =140.0, $s_1^m = 120.0$ MPa、$s_2^m = 0.0$ MPa 和 $s_3^m = 90.0$ MPa 。短纤维增强复合材料

部件以 40 m/s 的初始速度朝刚性杆运动，仿真总时间为 1.8 ms。

在仿真过程中，测量了复合材料部件与刚性杆动态相互作用所产生的接触力。图14绘出了合接触力随时间的变化历程，同时还展示了三个不同时间点变形的短纤维增强复合材料部件上的均质化冯·米塞斯应力；图15则绘出了基体相发生塑性变形所导致的均质化等效塑性应变（EPS）的演变过程。在这些图中，冯·米塞斯应力根据深度材料网络顶层的均质化应力张量计算，而均质化EPS则通过前向传播深度材料网络底层基体相中的微观EPS获得。结果清楚地表明，本文提出的多尺度方法能够捕捉短纤维增强复合材料结构复杂的动态塑性变形。

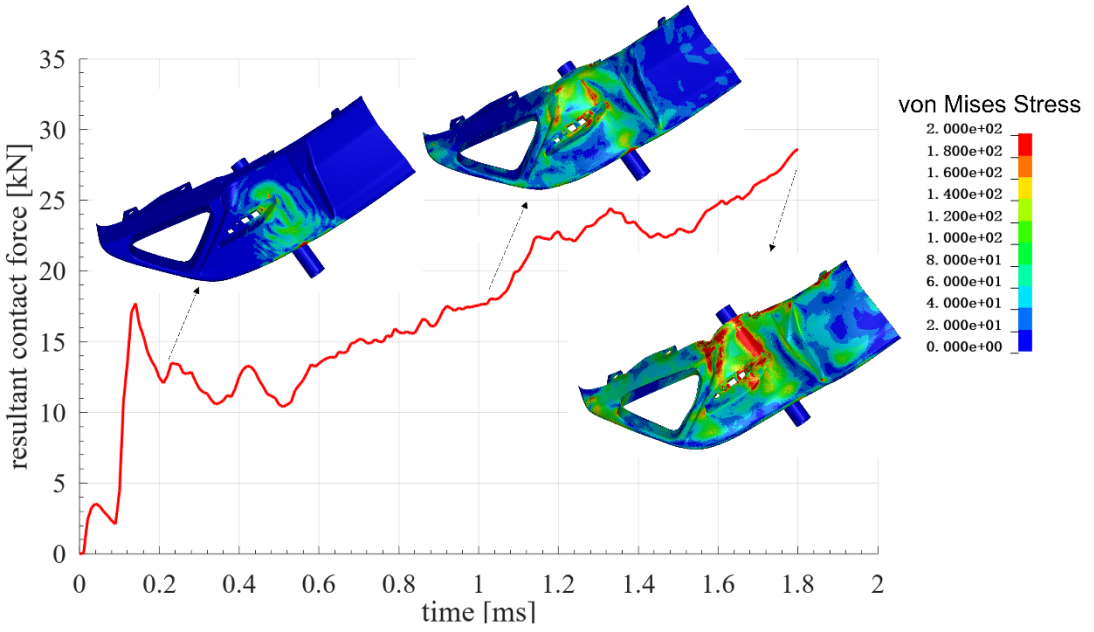


图 14. 合接触力的时程曲线，其中展示了变形的短纤维增强复合材料部件上的均质化冯·米塞斯应力分布。

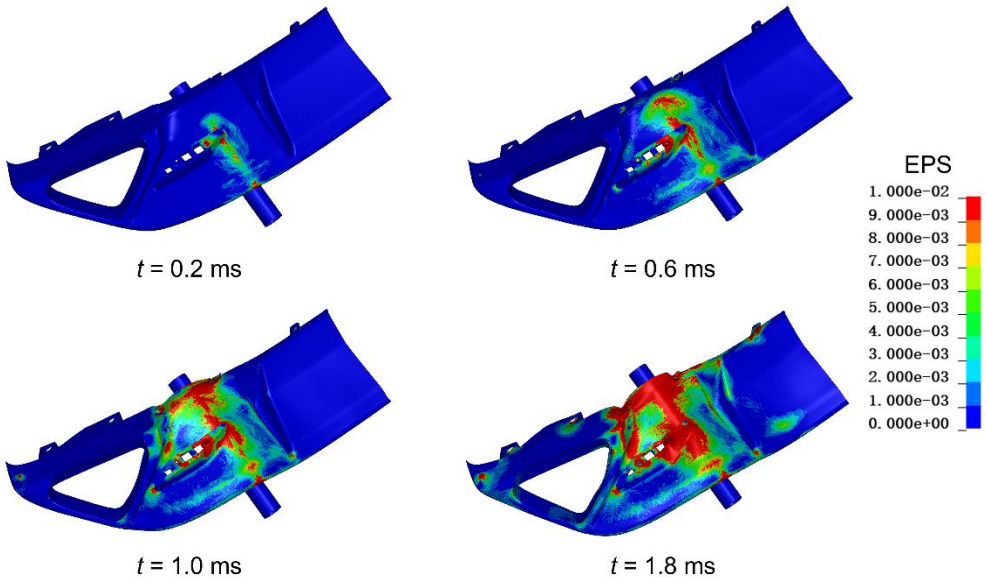


图15。 LS-DYNA机器学习多尺度模拟结果：动态冲击接触过程中，变形的短纤维增强复合材料部件上均质化等效塑性应变（EPS）的分布。

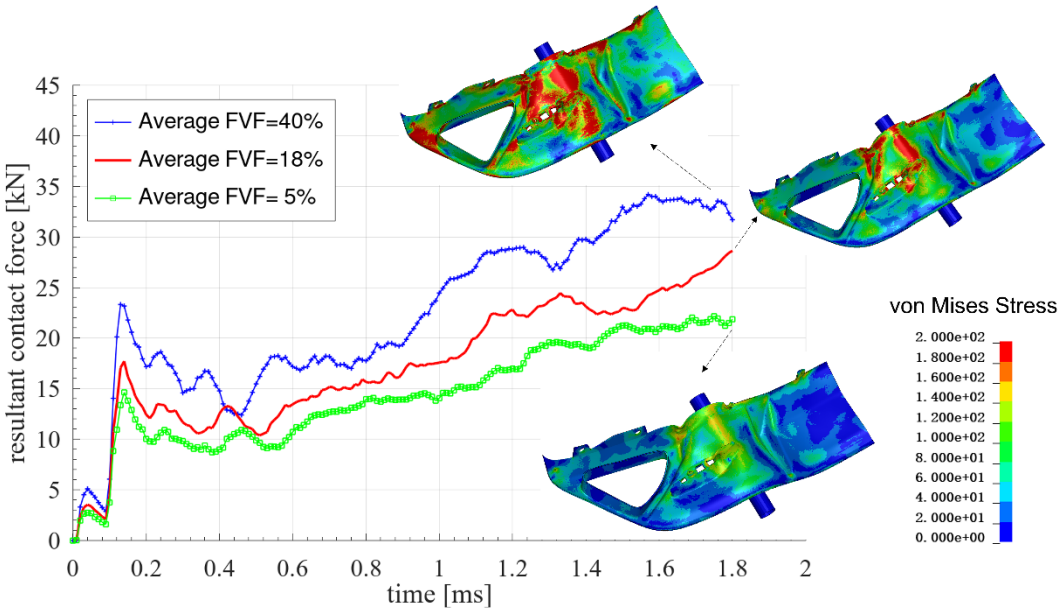


图16。 LS-DYNA机器学习多尺度模拟结果：平均纤维体积分数（FVF）分别为5%、18%和40%的三个短纤维增强复合材料部件上的合接触力和冯·米塞斯应力分布。

由于汽车零件采用注射成型工艺制造，纤维取向和体积分数的分布会受到多种成型工艺参数的影响，例如零件形状和厚度、注射浇口的数量和位置、模具温度以及充填时间。以下，我们对具有不同纤维体积分数的汽车零件进行了多尺度结构模拟，以考察微观结构分布对复合材料力学行为的影响。为进行说明，我们另外进行了两次注塑成型模拟，分别采用较高和较低的纤维质量百分比。由此得到的纤维体积分数平均值分别为5%和40%；由于其他成型工艺参数保持不变，预测得到的纤维取向分布与图13所示的先前注塑成型模拟结果相似。图16中绘出了这两个模型的LS-DYNA多尺度模拟结果，并与先前平均纤维体积分数为18%的短纤维增强复合材料模型的结果一同展示。可以看出，在相同的动态冲击过程中，纤维体积分数较高的钢纤维增强混凝土构件表现出更高的刚度。这表明，基于机器学习的多尺度方法能够有效捕捉微观结构对宏观响应的影响，这对于短纤维增强复合材料制品的多尺度设计和分析至关重要。除了结构分析之外，当前这种制造工艺信息驱动的多尺度模拟方法还能使工程师根据力学模拟结果的反馈优化成型工艺设计。

结论

注射成型所导致的材料微观结构对可靠预测结构响应至关重要，不容忽视。因此，开发一种有效的数值方法，以捕捉局部材料微观结构（例如纤维取向、纤维体积分数）对复合材料整体结构行为的影响，对于短纤维增强复合材料结构的设计与分析极为重要。在本研究中，我们开发了一种基于 LS-DYNA 和机器学习的多尺度方法，有望用于工业规模注塑短纤维增强复合材料的非线性建模。在离线阶段，使用基于数值重构的高保真短纤维增强复合材料微观结构的线弹性数据训练深度材料网络数据库。将其与工程仿真软件 LS-DYNA 中的有限元集成后，通过高效的迁移学习方案在线生成与注射成型所导致的短纤维增强复合材料微观结构相对应的新深度材料网络。研究表明，与深度材料网络耦合的有限元算法能够有效预测短纤维增强复合材料的非线性材料响应和结构响应，且计算速度远快于高保真多尺度有限元模型。由于该机器学习模型兼具物理基础和数据驱动特性，其仿真

随着未来不断提供更多高质量训练数据，该能力可以持续增强。

据我们所知，我们提出了首个通用有限元分析软件包，将注塑成型诱导的微观结构、材料均匀化和机理机器学习集成起来，用于短纤维增强复合材料的多尺度结构分析。该方法完全有潜力扩展至不同类型材料的建模，包括颗粒增强复合材料、连续纤维增强复合材料、多晶金属、多孔介质等。目前，我们正在开展这些研究课题，新的研究结果将在未来的出版物中报告。

附录 I. 深度材料网络中的应变集中张量

对于两相复合材料，材料界面处应满足以下平衡条件和运动学条件：

$$\left(\sigma_{ij}^{p_2}-\sigma_{ij}^{p_1}\right)\cdot n_j=0 \tag{21}$$

$$u_i^{p_2}-u_i^{p_1}=0 \tag{22}$$

其中，索引 i、$j=1$、2、3、$\sigma_{ij}^{p_2}$ 和 $\sigma_{ij}^{p_1}$ 分别表示材料相 p_2 和 p_1 的应力张量分量 ij；$u_i^{p_2}$ 和 $u_i^{p_1}$ 分别表示材料相 p_2 和 p_1 的位移分量 i^{th}；n_j 表示界面处单位法向量的分量 j。考虑具有双层微观结构的复合材料，其中 $n_1=0$、$n_2=0$、$n_3=1$，基于式（21）可推导出一种简单形式的界面平衡条件：

$$\sigma_{33}^{p_1}=\sigma_{33}^{p_2},\ \sigma_{23}^{p_1}=\sigma_{23}^{p_2},\ \sigma_{13}^{p_1}=\sigma_{13}^{p_2} \tag{23}$$

此外，在平坦界面上施加运动学约束式 (22)（即*1-2* 平面）会对 $\boldsymbol{\varepsilon}^{p_1}$ 和 $\boldsymbol{\varepsilon}^{p_2}$的应变张量产生以下约束：

$$\varepsilon_{11}^{p_1}=\varepsilon_{11}^{p_2},\ \varepsilon_{22}^{p_1}=\varepsilon_{22}^{p_2},\ \varepsilon_{12}^{p_1}=\varepsilon_{12}^{p_2} \tag{24}$$

采用Mandel记号，应力张量和应变张量可转换为以下矩阵形式：

$$\{\boldsymbol{\sigma}^{p_j}\}=\left\{\sigma_{11}^{p_j}\quad\sigma_{22}^{p_j}\quad\sigma_{33}^{p_j}\quad\sqrt{2}\sigma_{12}^{p_j}\quad\sqrt{2}\sigma_{23}^{p_j}\quad\sqrt{2}\sigma_{31}^{p_j}\right\}^T \tag{25}$$

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}^{p_j}\}=\left\{\varepsilon_{11}^{p_j}\quad\varepsilon_{22}^{p_j}\quad\varepsilon_{33}^{p_j}\quad\sqrt{2}\varepsilon_{12}^{p_j}\quad\sqrt{2}\varepsilon_{23}^{p_j}\quad\sqrt{2}\varepsilon_{31}^{p_j}\right\}^T \tag{26}$$

其中，上标 $p_j = p_1$ 或 p_2 表示材料相。因此，每个材料相的本构模型可写为:

$$\{\boldsymbol{\sigma}^{p_j}\} = [\boldsymbol{C}^{p_j}]\{\boldsymbol{\varepsilon}^{p_j}\} \tag{27}$$

根据混合定则，平均应变定义为

$$\{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\} = \left(1 - v_f^{p_2}\right)\{\boldsymbol{\varepsilon}^{p_1}\} + v_f^{p_2}\{\boldsymbol{\varepsilon}^{p_2}\} \tag{28}$$

其中，$v_f^{p_2}$ 表示材料相 p_2的体积分数，可由

构建块中与材料相 p_1 和 p_2 相关的深度材料网络节点权重计算得到。将运动学约束式（24）代入式（28），可得材料相 p_1 的应变分量 11、22 和 12 等于平均应变分量:

$$\varepsilon_{11}^{p_1} = \bar{\varepsilon}_{11},\ \varepsilon_{22}^{p_1} = \bar{\varepsilon}_{22},\ \varepsilon_{12}^{p_1} = \bar{\varepsilon}_{12} \tag{29}$$

对于其余应变分量，将本构方程（27）代入界面平衡方程（23），并进一步结合式（29），可推导出材料相p_1 的应变与平均应变之间的关系，得到以下方程:

$$\begin{Bmatrix} \varepsilon_{33}^{p_1} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{23}^{p_1} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{31}^{p_1} \end{Bmatrix} = [\widehat{\boldsymbol{A}}]\{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\} \tag{30}$$

其中,

$$[\widehat{\boldsymbol{A}}] = \begin{bmatrix} \hat{C}_{33} & \hat{C}_{35} & \hat{C}_{36} \\ \hat{C}_{53} & \hat{C}_{55} & \hat{C}_{56} \\ \hat{C}_{63} & \hat{C}_{65} & \hat{C}_{66} \end{bmatrix}^{-1} [\widetilde{\boldsymbol{A}}] \tag{31}$$

$$[\widetilde{\boldsymbol{A}}] = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{31}^{p_2} & \tilde{C}_{32}^{p_2} & C_{33}^{p_2} & C_{34}^{p_2} & C_{35}^{p_2} & \tilde{C}_{36}^{p_2} \\ \tilde{C}_{51}^{p_2} & \tilde{C}_{52}^{p_2} & C_{53}^{p_2} & C_{54}^{p_2} & C_{55}^{p_2} & \tilde{C}_{56}^{p_2} \\ \tilde{C}_{61}^{p_2} & \tilde{C}_{62}^{p_2} & C_{63}^{p_2} & C_{64}^{p_2} & C_{65}^{p_2} & \tilde{C}_{66}^{p_2} \end{bmatrix} \tag{32}$$

$$\hat{C}_{ij} = \left(1 - v_f^{p_2}\right)C_{ij}^{p_2} + v_f^{p_2}C_{ij}^{p_1} \tag{33}$$

$$\tilde{C}_{ij}^{p_2} = v_f^{p_2}\left(C_{ij}^{p_2} - C_{ij}^{p_1}\right) \tag{34}$$

结合式(29)和式(30)，可得以下方程，该方程将深度材料网络构建单元的平均应变与材料相 p_1 的应变联系起来:

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}^{p_1}\} = [\boldsymbol{A}]\{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}\} \tag{35}$$

其中， $[\boldsymbol{A}]$ 是深度材料网络中应变集中张量的Mandel矩阵形式，可表示为以下解析形式：

$$[\boldsymbol{A}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{A}_{11} & \hat{A}_{12} & \hat{A}_{13} & \hat{A}_{14} & \hat{A}_{15} & \hat{A}_{16} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hat{A}_{21} & \hat{A}_{22} & \hat{A}_{23} & \hat{A}_{24} & \hat{A}_{25} & \hat{A}_{26} \\ \hat{A}_{31} & \hat{A}_{32} & \hat{A}_{33} & \hat{A}_{34} & \hat{A}_{35} & \hat{A}_{36} \end{bmatrix} \tag{36}$$

其中， $\hat{A}_{ij}$ 是深度材料网络的节点权重和刚度的函数

材料相 p_1 和 p_2，如式（31）所定义。

附录II. 二阶纤维取向张量

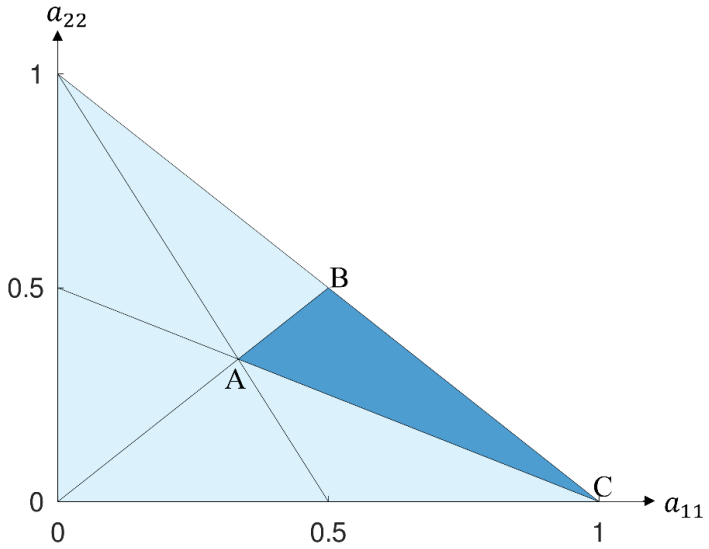


图17. 由二阶纤维取向张量a_{ij}的两个最大特征值 a_{11} 和 a_{22} 参数化的纤维取向状态空间。

在短-纤维-增强复合材料部件中，任意空间点的纤维取向状态均可用二阶-纤维取向张量 a_{ij} (*Advani和Tucker三世，1987年*)：

$$a_{ij} = \oint p_i p_j \psi(\boldsymbol{p})\, d\boldsymbol{p} \tag{37}$$

其中， $\boldsymbol{p}$ 表示沿单根短纤维轴向的单位向量， $\psi(\boldsymbol{p})$是概率分布函数，其定义为：在方向 $\boldsymbol{p}$ 的 $d\boldsymbol{p}$ 角度范围内发现纤维的概率为 $\psi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}$。由于所有可能的

$\boldsymbol{p}$ 的方向对应于一个单位球面，对整个范围积分 $\oint p_i p_j \psi(\boldsymbol{p}) d\boldsymbol{p}$

$\boldsymbol{p}$ 的范围等价于在单位球面表面上对 $p_i p_j$ 与 $\psi(\boldsymbol{p})$ 的乘积进行积分。式（37）清楚地表明，张量 a_{ij} 是对称的。此外，概率分布函数的归一化条件意味着 a_{ij} 的迹始终等于 1。因此，a_{ij} 只有 5 个独立分量。若将纤维取向张量旋转到由其三个正交特征向量定义的主轴坐标系中，则可将其表示为对角矩阵形式：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix} \tag{38}$$

其中，对角分量是 a_{ij} 的三个非负特征值；由于它们满足 $a_{11} + a_{22} + a_{33} = 1$，因此只剩下 2 个独立分量。

如果对特征值施加约束 $a_{11} \geq a_{22} \geq a_{33}$，那么所有可能的纤维取向状态都落在图 17 中高亮显示的三角形 A-B-C 内。若不施加这一约束，图 17 的其他三角区域内也可能存在纤维取向状态，但这些取向状态都可以通过刚体旋转映射到高亮显示的三角区域，因此我们可以只关注这个较小区域，而不失一般性。正如（*Cintra 和 Tucker III，1995*）中所述，这个三角区域的顶点具有重要的物理意义。标记为 A 的点对应随机三维取向状态，其中 $a_{11} = a_{22} = a_{33} = 1/3$，所有纤维在各个方向上均匀分布。点 B 对应随机二维取向状态，其中 $a_{11} = a_{22} = 1/2$，$a_{33} = 0$，所有纤维均匀分布于一个平面内的各个方向。点 C 对应单向纤维取向状态，其中 $a_{11} = 1$，$a_{22} = a_{33} = 0$，所有纤维彼此平行。显然，这三个顶点处的纤维取向张量的线性组合可以得到三角形内任意位置的纤维取向张量。

致谢

作者谨向 Zeliang Liu、Tianyu Huang、Dandan Lyu、Yong Guo、Kai Wang 和 Philip Ho 致以谢意，感谢他们在多尺度方法开发方面给予的大力帮助；同时也感谢 Madhu Keshavamurthy 一直以来对本研究工作的支持。第一作者感谢 Xiaolong He 就机器学习方法进行深入探讨。此外，我们衷心感谢匿名审稿人提出的建设性意见。

参考文献

1. Advani, S. G., and C. L. T. I. I. I. 1987. “运用张量描述和预测短纤维复合材料中的纤维取向。”《流变学杂志》, 31 (8): 751–784. https://doi.org/10.1122/1.549945. 2. Baek, J., J. S. Chen, and K. Susuki. 2022. “一种用于应变局部化建模的神经网络增强型再生核粒子法。”《国际工程数值方法杂志》。https://doi.org/10.1002/nme.7040. 3. Belytschko, T., W. K. Liu, B. Moran, and K. Elkhodary. 2014. 《连续体与结构的非线性有限元》。John Wiley & Sons. 4. Bishara, D., Y. Xie, W. K. Liu, and S. Li. 2022. “机器学习驱动的多尺度建模、仿真、均匀化与材料设计最新研究综述。”《工程计算方法档案》, 1-32. https://doi.org/10.1007/s11831-022-09795-8. 5. Bonatti, C., and D. Mohr. 2022. “自洽性对于表征弹塑性固体的循环神经网络模型的重要性。”《固体力学与物理学杂志》, 158, 104697. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104697. 6. Bostanabad, R., B. Liang, J. Gao, W. K. Liu, J. Cao, D. Zeng, X. Su, H. Xu, Y. Li, and W. Chen. 2018. “纤维编织复合材料多尺度仿真中的不确定性量化。”《计算力学与工程方法》, 338: 506–532. https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.04.024. 7. Chen, Z., T. Huang, Y. Shao, Y. Li, H. Xu, K. Avery, D. Zeng, W. Chen, and X. Su. 2018. “基于随机细观结构重构的片状模塑料（SMC）复合材料结构多尺度有限元建模。”《复合材料结构》, 188: 25–38. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2017.12.039. 8. Cintra Jr, J. S., and C. L. Tucker III, 1995. “流动诱导纤维取向的正交各向异性闭合近似。”《流变学杂志》, 39(6), 1095-1122. https://doi.org/10.1122/1.550630. 9. Eggersmann, R., T. Kirchdoerfer, S. Reese, L. Stainier, and M. Ortiz. 2019. “无模型数据驱动非弹性。”《计算力学与工程方法》, 350: 81–99. https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.02.016. 10. Eshelby, J. D., and R. E. Peierls. 1957. “椭球形夹杂弹性场的确定及相关问题。”《伦敦皇家学会会刊》. 系列 A：数学与物理科学, 241 (1226): 376–396. 皇家学会。https://doi.org/10.1098/rspa.1957.0133. 11. Feyel, F. 2003. “一种利用广义连续体描述高度非线性结构响应的多层次有限元法（FE^2）。”《计算力学与工程方法》, 192 (28): 3233–3244. https://doi.org/10.1016/S0045-7825(03)00348-7. 12. Feyel, F., and J.-L. Chaboche. 2000. “用于建模的 FE^2 多尺度方法

长纤维 SiC/Ti 复合材料的弹黏塑性行为。”《计算力学与工程方法》，183 (3)：309–330。https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00224-8。13. Fish, J., G. J. Wagner, and S. Keten. 2021年。“材料中的介观与多尺度建模。”《自然材料》，20 (6)：774–786。https://doi.org/10.1038/s41563-020-00913-0。14. Frankel, A. L., R. E. Jones, C. Alleman, and J. A. Templeton. 2019年。“利用深度学习预测低晶粒数晶体的力学响应。”《计算材料科学》，169：109099。https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109099。15. Fritzen, F., M. Fernández, and F. Larsson. 2019年。“利用人工神经网络和降阶建模实现非线性双尺度模拟的在线自适应。”《材料前沿》，6 (75)。https://doi.org/10.3389/fmats.2019.00075。16. Fritzen, F., and O. Kunc. 2018年。“基于降阶模型的非线性固体两阶段数据驱动均匀化。”《欧洲力学杂志——A辑/固体》，69：201–220。https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2017.11.007。17. Gajek, S., M. Schneider, and T. Böhlke. 2020年。“深度材料网络的微观力学。”《固体力学与物理学杂志》，142：103984。https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.103984。18. Gajek, S., M. Schneider, and T. Böhlke. 2021年。“用于短纤维增强塑料部件多尺度分析的 FE-DMN 方法。”《计算力学与工程方法》，384：113952。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113952。19. Gajek, S., M. Schneider, and T. Böhlke. 2022年。“用于热力学复合材料多尺度分析的 FE-DMN 方法。”《计算力学》，69 (5)：1087–1113。https://doi.org/10.1007/s00466-021-02131-0。20. Gao, J., M. Shakoor, G. Domel, M. Merzkirch, G. Zhou, D. Zeng, X. Su, and W. K. Liu. 2020年。“单向碳纤维增强聚合物的预测性多尺度建模。”《复合材料科学与技术》，186：107922。https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2019.107922。21. Ghaboussi, J., J. H. Garrett, and X. Wu. 1991。“利用神经网络进行基于知识的材料行为建模。”《工程力学杂志》，117 (1)：132–153。美国土木工程师学会。https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9399(1991)117:1(132)。22. Ghavamian, F., and A. Simone. 2019年。“利用循环神经网络加速历史相关材料的多尺度有限元模拟。”《计算力学与工程方法》，357：112594。https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112594。23. Goodfellow, I., Y. Bengio, and A. Courville. 2016年。《深度学习》。马萨诸塞州剑桥：麻省理工学院出版社。24. Goury, O., D. Amsallem, S. P. A. Bordas, W. K. Liu, and P. Kerfriden. 2016年。“自动化

在计算损伤微观力学中选择载荷路径以构建降阶模型：从耗散驱动的随机选择到贝叶斯优化。”《计算力学》，58 (2)：213–234。https://doi.org/10.1007/s00466-016-1290-2。25. He, Q., and J. S. Chen. 2020. “基于局部凸重构、针对含噪数据库的物理约束数据驱动方法。”《计算力学与工程方法》，363：112791。https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112791。26. He, Q., D. W. Laurence, C. H. Lee, and J. S. Chen. 2021a. “基于流形学习的软生物组织数据驱动建模。”《生物力学杂志》，117，110124。https://doi.org/10.1016/j.jbiomech.2020.110124。27. He, X., Q. He, and J. S. Chen. 2021b. “用于物理约束的数据驱动非线性材料建模的深度自编码器。”《计算力学与工程方法》，385，114034。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114034。28. He, X., Q. He, J. S. Chen, U. Sinha, and S. Sinha. 2020. “各向异性非线性弹性固体的物理约束局部凸性数据驱动建模。”《数据中心工程》，1。E19。https://doi.org/10.1017/dce.2020.20。29. He, X., and J. S. Chen. 2022. “用于路径相关材料数据驱动建模的热力学一致的机器学习内变量方法。”《计算力学与工程方法》，115348。https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115348。30. Hessman, P. A., T. Riedel, F. Welschinger, K. Hornberger, and T. Böhlke. 2019. “基于X射线显微计算机断层扫描的短玻璃纤维增强热塑性塑料微观结构分析。”《复合材料科学与技术》，183：107752。https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2019.107752。31. Huang, T. H., H. Wei, J. S. Chen, and M. C., Hillman. 2020. “RKPM2D：用于求解偏微分方程的节点积分再生核粒子法开源实现。”《计算粒子力学》，7(2)，393-433。https://doi.org/10.1007/s40571-019-00272-x。32. Huang, T., Z. Liu, C. T. Wu, and W. Chen. 2022. “用于快速非线性材料建模和不确定性量化的微观结构引导的深度材料网络。”《计算力学与工程方法》，398：115197。https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115197。33. Huang, W., R. Xu, J. Yang, Q. Huang, and H. Hu. 2021. “基于材料孪生体的纤维增强聚合物数据驱动多尺度模拟。”《复合材料结构》，256：113013。https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.113013。34. Huang, Z. M. 2021. “连续/短纤维或颗粒增强复合材料的本构关系、变形、失效与强度。”《复合材料结构》，262，113279。https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.113279。35. Ibanez, R., E. Abisset-Chavanne, J. V. Aguado, D. Gonzalez, E. Cueto, and F. Chinesta. 2018. “一种用于数据驱动计算弹性力学的流形学习方法，以及

非弹性。”《工程计算方法档案》, 25(1), 47-57. https://doi.org/10.1007/s11831-016-9197-9. 36. Kaneko, S., H. Wei, Q. He, J. S. Chen, and S. Yoshimura. 2021. “一种用于加速模拟热循环诱发塑性变形的超降阶计算方法。”《固体力学与物理学杂志》, 151, 104385. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104385. 37. Karapiperis, K., L. Stainier, M. Ortiz, and J. E. Andrade. 2020. “力学中的数据驱动多尺度建模。”《固体力学与物理学杂志》, 104239. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104239. 38. Kirchdoerfer, T., and M. Ortiz. 2016. “数据驱动计算力学。”《计算力学与工程方法》, 304: 81–101. https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.02.001. 39. Kochmann, J., S. Wulfinghoff, L. Ehle, J. Mayer, B. Svendsen, and S. Reese. 2018. “高效且精确地基于双尺度有限元-快速傅里叶变换预测弹黏塑性多晶体的有效材料行为。”《计算力学》, 61 (6): 751–764. https://doi.org/10.1007/s00466-017-1476-2. 40. Kouznetsova, V. G., M. G. D. Geers, and W. A. M. Brekelmans. 2004. “多相材料的多尺度二阶计算均匀化：一种嵌套有限元求解策略。”《计算力学与工程方法》, 193 (48): 5525–5550. https://doi.org/10.1016/j.cma.2003.12.073. 41. Le, B. A., J. Yvonnet, and Q.-C. He. 2015. “使用神经网络对非线性弹性材料进行计算均匀化。”《国际工程数值方法杂志》, 104 (12): 1061–1084. https://doi.org/10.1002/nme.4953. 42. LeCun, Y., Y. Bengio, and G. Hinton. 2015. “深度学习。”《自然》, 521 (7553): 436–444. https://doi.org/10.1038/nature14539. 43. Li, S., and G. Wang. 2008.《微观力学与纳米力学导论》。世界科学出版社。44. Ling, J., R. Jones, and J. Templeton. 2016. “具有不变性性质的系统的机器学习策略。”《计算物理学杂志》, 318, 22-35. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.05.003. 45. Liu, X., S. Tian, F. Tao, and W. Yu. 2021. “复合材料本构建模中人工神经网络的综述。”《复合材料B辑：工程》, 224, 109152. https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2021.109152. 46. Liu, Z. 2020. “带内聚层的深度材料网络：多阶段训练与界面失效分析。”《计算力学与工程方法》, 363: 112913. https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.112913. 47. Liu, Z. 2021. “用于多尺度应变局部化建模的深度材料网络中的细胞划分。”《计算力学与工程方法》, 384: 113914. https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113914.

48. Liu, Z.、M. A. Bessa 和 W. K. Liu。2016年。“自洽聚类分析：一种用于非弹性非均质材料的高效多尺度方案。”《计算力学与工程方法》，306：319–341。https://doi.org/10.1016/j.cma.2016.04.004。49. Liu, Z.、M. Fleming 和 W. K. Liu。2018年。“用于弹塑性应变软化材料自洽聚类分析的微观结构材料数据库。”《计算力学与工程方法》，330：547–577。https://doi.org/10.1016/j.cma.2017.11.005。50. Liu, Z.、H. Wei、T. Huang 和 C. T. Wu。2020年。“基于工艺引导的复合材料数据库的智能多尺度模拟。”第16届国际LS-DYNA用户会议，https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.09491。51. Liu, Z. 和 C. T. Wu。2019年。“探索数据驱动的多尺度力学中深度材料网络的三维架构。”《固体力学与物理学杂志》，127：20–46。https://doi.org/10.1016/j.jmps.2019.03.004。52. Liu, Z.、C. T. Wu 和 M. Koishi。2019a。“ 用于非均质材料多尺度拓扑学习和加速非线性建模的深度材料网络。”《计算力学与工程方法》，345：1138–1168。https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.09.020。53. Liu, Z.、C. T. Wu 和 M. Koishi。2019b。“用于无缝结构—性能预测的深度材料网络迁移学习。”《计算力学》，64（2）：451–465。https://doi.org/10.1007/s00466-019-01704-4。54. Lu, X.、D. G. Giovanis、J. Yvonnet、V. Papadopoulos、F. Detrez 和 J. Bai。2019年。“一种基于神经网络的石墨烯/聚合物纳米复合材料非线性各向异性电响应的数据驱动计算均匀化方法。”《计算力学》，64（2）：307–321。https://doi.org/10.1007/s00466-018-1643-0。55. Masi, F.、I. Stefanou、P. Vannucci 和 V. Maffi-Berthier。2021年。“基于热力学的人工神经网络用于本构建模。”《固体力学与物理学杂志》，147，104277。https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104277。56. Mora-Macías, J.、J. Ayensa-Jiménez、E. Reina-Romo、M. H. Doweidar、J. Domínguez、M. Doblaré 和 J. A. Sanz-Herrera。2020年。“用于骨组织生物力学的多尺度数据驱动方法。”《计算力学与工程方法》，368：113136。https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113136。57. Mori, T. 和 K. Tanaka。1973年。“具有失配夹杂的材料中的平均应力和平均弹性能。”《冶金学报》，21（5）：571–574。https://doi.org/10.1016/0001-6160(73)90064-3。58. Mortazavian, S. 和 A. Fatemi。2015年。“纤维取向和各向异性对短纤维增强聚合物复合材料抗拉强度和弹性模量的影响。”《复合材料B辑：工程》，72：116–129。https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2014.11.041。

59. Müller, V., M. Kabel, H. Andrä, and T. Böhlke. 2015. “短纤维增强复合材料线弹性性质的均匀化——均场方法与基于体素的方法比较。”《国际固体与结构杂志》，67，56-70。https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2015.02.030。60. Müller, V., and T. Böhlke. 2016. “利用纤维取向张量预测纤维增强复合材料的有效弹性性质。”《复合材料科学与技术》，130：36–45。https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2016.04.009。61. Naili, C., I. Doghri, T. Kanit, M. S. Sukiman, A. Aissa-Berraies, and A. Imad. 2020. “短纤维增强复合材料：弹性领域各种均匀化方法的无偏全场评估”。《复合材料科学与技术》，187，107942。https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2019.107942。62. Nemat-Nasser S., and M. Hori. 2013.《微观力学：非均质材料的整体性质》。爱思唯尔。63. Nguyen, V. D., and L. Noels. 2022年. “从相互作用视角重新审视基于微观力学的材料网络；用于多相复合材料的稳健高效实现。”《欧洲力学杂志——A辑/固体》，91：104384。https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2021.104384。64. Nguyen, V. D., and L. Noels. 2022年. “基于相互作用的材料网络：适用于（多孔）微结构材料的通用框架。”《计算力学与工程方法》，389：114300。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114300。65. Nordmann, J., M. Aßmus, and H. Altenbach. 2018年. “弹性各向异性的可视化：理论背景与计算实现。”《连续介质力学与热力学》，30(4)，689-708。https://doi.org/10.1007/s00161-018-0635-9。66. Pasetto, M., J. Baek, J. S. Chen, H. Wei, J. A. Sherburn, M. J. Roth. 2021年. “用于加速无网格建模极端变形问题的拉格朗日/半拉格朗日耦合方法。”《计算力学与工程方法》，381，113827。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113827。67. Rao, C., and Y. Liu. 2020. “用于非均质材料均匀化的三维卷积神经网络（3D-CNN）。”《计算材料科学》，184，109850。https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109850。68. Rocha, I. B. C. M., P. Kerfriden, and F. P. van der Meer. 2020. “用于预测复合材料响应的基于微观力学的代理模型：经典细观尺度本构模型、超降阶与神经网络之间的批判性比较。”《欧洲力学杂志——A辑/固体》，82，103995。https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2020.103995。69. Sanz-Herrera, J. A., J. Mora-Macías, J. Ayensa-Jiménez, E. Reina-Romo, M. H. Doweidar, J. Domínguez, and M. Doblaré. 2021年. “骨力学中的数据驱动计算模拟。”《生物医学工程年鉴》，49(1)，407-419。https://doi.org/10.1007/s10439-020-02550-9。70. Tan, V. B. C., K. Raju, and H. P. Lee. 2020. “用于并发多层级

异质结构建模。”《计算力学与工程方法》，360，112694。https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.112694。71. Tao, F., X. Liu, H. Du, and W. Yu. 2022年。“用于复合材料本构建模的有限元耦合正定深度神经网络力学系统。”《计算力学与工程方法》，391，114548。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.114548。72. Terada, K., J. Kato, N. Hirayama, T. Inugai, and K. Yamamoto. 2013。“采用微观-宏观解耦方案的双尺度分析方法：在超弹性复合材料中的应用。”《计算力学》，52(5)，1199-1219。https://doi.org/10.1007/s00466-013-0872-5。73. Tucker III, C. L., and E. Liang. 1999。“单向短纤维复合材料的刚度预测：综述与评估。”《复合材料科学与技术》，59(5)，655-671。https://doi.org/10.1016/S0266-3538(98)00120-1。74. Sanz-Herrera, J. A., J. Mora-Macías, J. Ayensa-Jiménez, E. Reina-Romo, M. H. Doweidar, J. Domínguez, and M. Doblaré. 2021年。“骨力学中的数据驱动计算模拟。”《生物医学工程年鉴》，49 (1)：407–419。https://doi.org/10.1007/s10439-020-02550-9。75. Spahn, J., H. Andrä, M. Kabel, and R. Müller. 2014年。“采用快速傅里叶变换对复合材料渐进损伤进行建模的多尺度方法。”《计算力学与工程方法》，268：871–883。https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.10.017。76. Vlassis, N. N., R. Ma, and W. Sun. 2020年。“用于计算力学的几何深度学习第一部分：各向异性超弹性。”《计算力学与工程方法》，371：113299。https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.113299。77. Vlassis, N. N., and W. Sun. 2021年。“用于可解释弹塑性模型及水平集硬化的热力学信息神经网络的索伯列夫训练。”《计算力学与工程方法》，377，113695。https://doi.org/10.1016/j.cma.2021.113695。78. Vu-Quoc, L., and A. Humer. 2022年。“深度学习在计算力学中的应用：全面综述、最新进展与经典研究。”arXiv预印本。https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.08989。79. Wang, H. P., C. T. Wu, Y. Guo, and M. E. Botkin. 2009年。“用于汽车耐撞性模拟的耦合无网格/有限元方法。”《国际冲击工程杂志》，36(10-11)，1210-1222。https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2009.03.004。80. Wang, K., and W. Sun. 2018年。“通过递归均匀化和深度学习关联的多尺度多渗透率孔隙弹塑性模型。”《计算力学与工程方法》，334：337–380。https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.01.036。81. Wang, M. L., R. Y. Chang, and C. H. D. Hsu. 2018年。《模塑模拟：理论与

实践。Carl Hanser Verlag GmbH Co KG。82. Wei, H.、C.T. Wu、D. Lyu、W. Hu、F. H. Rouet、K. Zhang、P. Ho、H. Oura、M. Nishi、T. Naito 和 L. Shen。2021年。“短纤维增强复合材料的多尺度模拟：从计算均匀化到 LS-DYNA 中的机理机器学习。”第十三届欧洲 LS-DYNA 会议论文集。德国乌尔姆。
https://www.dynalook.com/conferences/13th-european-ls-dyna-conference-2021/composites/wei_ansys_lst.pdf 83. Wei, H.、D. Lyu、W. Hu 和 C. T. Wu。2022年。“LS-DYNA 中用于高保真多尺度材料建模的代表性体积单元分析。”arXiv 预印本，https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.11761。84. Wu, C. T.、Y. Wu、D. Lyu、X. Pan 和 W. Hu。2020年。“用于模拟流钻螺钉旋入过程极限螺纹成形的动量一致光滑粒子 Galerkin（MC-SPG）方法。”《计算粒子力学》，7：177-191。https://doi.org/10.1007/s40571-019-00235-2。85. Wu, L.、L. Adam 和 L. Noels。2021年。“机织复合材料多尺度分析的微观力学与数据驱动降阶模型。”《复合材料结构》，270：114058。https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.114058。86. Xu, K.、D. Z. Huang 和 E. Darve。2021年。“使用对称正定神经网络学习本构关系。”《计算物理学杂志》，428，110072。https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.110072。87. Xu, R.、J. Yang、W. Yan、Q. Huang、G. Giunta、S. Belouettar、H. Zahrouni、T. ben Zineb 和 H. Hu。2020年。“数据驱动多尺度有限元法：从并存到分离。”《计算力学与工程方法》，363：112893。https://doi.org/10.1016/j.cma.2020.112893。88. Yu, C.、O. L. Kafka 和 W. K. Liu。2019年。“有限应变下多尺度建模的自洽聚类分析。”《计算力学与工程方法》，349：339–359。https://doi.org/10.1016/j.cma.2019.02.027。89. Yvonnet, J. 和 Q. C. He。2007年。“降阶模型多尺度方法（R3M）用于有限应变下超弹性介质的非线性均匀化。”《计算物理学杂志》，223（1）：341–368。https://doi.org/10.1016/j.jcp.2006.09.019。

数据可用性声明

研究期间生成或使用的部分或全部数据、模型或代码属于专有或机密性质，可能仅在受到限制的情况下提供。