有限元方法中材料非线性计算综述

冯建文　博士　工程师

fengjianwen@comac.cc

有限元方法是固体力学一种通用的数值方法。对于服从胡克定律的线弹性材料的静力学问题，有限元方法将待求问题演化为 $\boldsymbol{Ku} = \boldsymbol{f}^{\mathrm{ext}}$ 的线性方程组形式，其中 $\boldsymbol{K}$ 为对称正定的刚度矩阵，$\boldsymbol{f}^{\mathrm{ext}}$ 为外荷载节点荷载向量，$\boldsymbol{u}$ 为待求节点位移向量。采用预条件处理的共轭梯度法可以轻松地求解自由度为千万级别的线性方程组。然而，现实中的很多材料属于非线性材料：橡胶是一种超弹性材料；塑性成形过程中的金属需要考虑应力-应变的非线性；聚合物等高分子材料有可能展现出流变的性质，即变形不仅依赖于受力而且与时间相关；损伤力学中又需要考虑弹性模量等性质随加载循环变化。非线性材料的有限元求解要比线性材料的求解难得多，幸亏成熟的商用软件包使得工程师可以较方便地模拟材料的非线性性能。然而，即使使用商用软件，非线性材料的计算需要设置很多材料参数及加载参数，如果这些参数设计得不合理的话不仅会加大计算负担，甚至有可能导致求解不收敛或者计算出错误的结果。

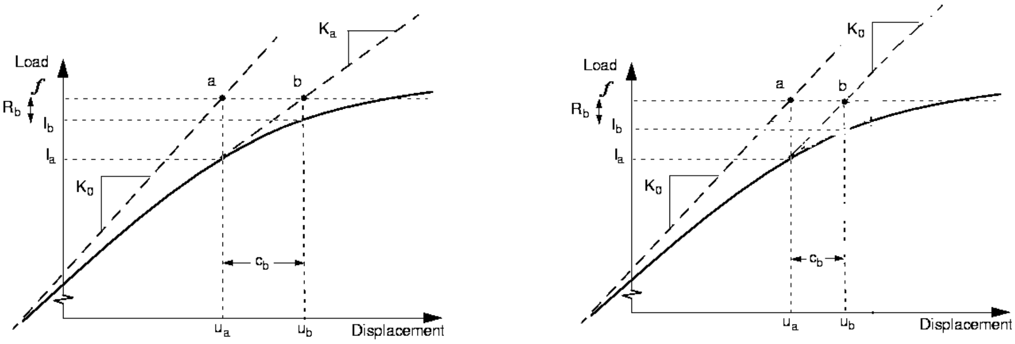
正确使用商用有限元软件需要用户对非线性计算的基本概念有明晰的了解。计算塑性力学影响力较大教材有 Owen[1，2]、Zienkiewicz[3]、Belytschko[4]、Hughes[5]、王勖成[6]等人的著作。本文结合有限元商用软件 ABAQUS®简要介绍了有限元处理材料非线性问题的基本思路，并给出了相关的参考文献供读者进一步查询，以期达到抛砖引玉的效果。

1. 分步加载及非线性方程组的迭代求解：

与线性问题不同，非线性问题中材料的最终变形与加载路径有关，非线性问题中荷载不能一次性全部加载，而是需要采取增量方式，即

$$\boldsymbol{f}^{\text{int}}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{f}^{\text{ext}} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{f}^{\text{int}}(\boldsymbol{u})$ 是节点内力向量。非线性方程组(1)的求解通常使用 Newton-Raphson 迭代方法。Newton-Raphson 方法要求在给定 $\boldsymbol{u}$ 的时候计算的切线刚度 $\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$，$\boldsymbol{K}^{\text{ep}} = \partial \boldsymbol{f}^{\text{int}}(\boldsymbol{u}) / \partial \boldsymbol{u}$。$\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$ 与材料的状态有关，$\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$ 的计算将在后文中提及，现在假定在给定 $\boldsymbol{u}$ 的情况下 $\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$ 已经算出。



(a) (b)

图 1 Newton-Raphson 法与 Quasi-Newton 法

Newton-Raphson 法如图 1(a)所示，是最常用的求解非线性代数方程组的方法，也通常是有限元软件中的默认求解工具。Newton-Raphson 法需要在每一个试探点（点 a，点 b）上重新集成切线集成刚度矩阵 $\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$。当求解问题规模很大时，每次重新集成切线刚度矩阵 $\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$ 会非常耗时，可以采用 Quasi-Newton 法替代。Quasi-Newton 法每次迭代中用同样的切线刚度矩阵，不需重新集成 $\boldsymbol{K}^{\text{ep}}$，但是 Quasi-Newton 法的收敛效率不如 Newton-Raphson 法高，需要迭代次数比较多。

非线性方程组(1)迭代法计算中收敛无法直接根据 $\boldsymbol{u}$ 的误差判断，因为真解预先不知道。迭代法根据残差 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{f}^{\text{ext}} - \boldsymbol{f}^{\text{int}}(\boldsymbol{u})$ 的向量模简介判断解的收敛。

非线性代数方程求解中最棘手的是出现不稳定平衡，当材料应力-应变关系出现软化段或者结构失稳的时候均可能导致这一现象，如图 2 所示。图 2 中 A 和 B 点都是可能的解，使用 Newton-Raphson 法会使收敛速度减慢甚至没法确定真解。

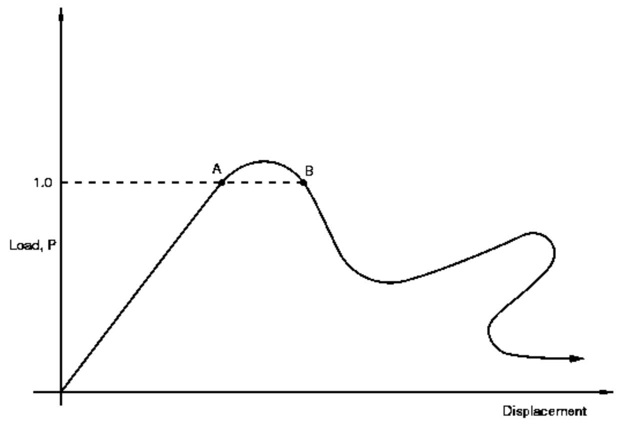


图 2 不稳定平衡

有限元软件一般使用弧长法(Arc-Length method)[7, 8]来加速Newton-Raphson法。图 1 传统的 Newton 法外迭代过程中外荷载 $\boldsymbol{f}^{\text{ext}}$ 是一个定值，而弧长法如图 3 所示。弧长法中允许外荷载 $\boldsymbol{f}^{\text{ext}}$ 以一个比例因子 λ ($\lambda \le 1$)变化，当迭代中发现 λ 过大以致内力 $\boldsymbol{f}^{\text{int}}(\boldsymbol{u})$ 无法达到平衡的话会下调 λ 的值使得计算进行下去。

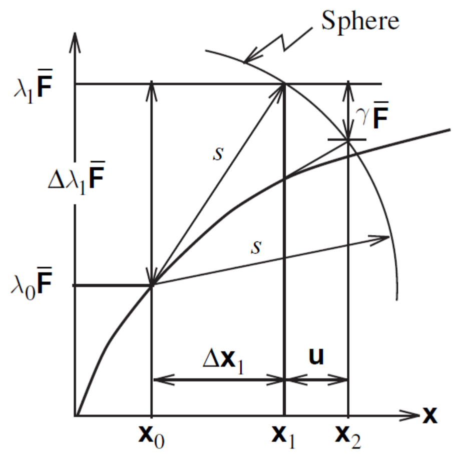


图 3 弧长法[9]

ABAQUS®软件会在计算过程中显示迭代情况，如图 4 所示。表中 Att 一项记录 Newton 法试探迭代的次数。LPF(load proportionality factor)一项记录比例因子 λ，λ 增大说明试探荷载在增大，λ 减小则说明试探荷载在降低，需要考虑材料是否出现软化现象。

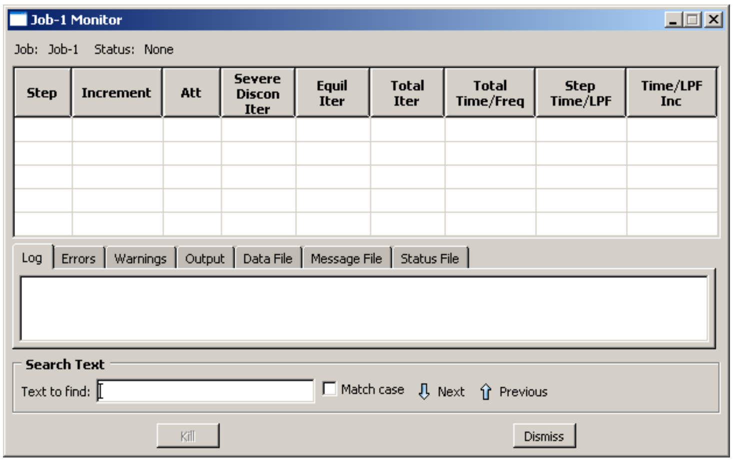


图 4 ABAQUS®进程监测窗口

需要特别强调的是，即使使用弧长法加速技巧，也没有任何有限元软件能保证任何非线性求解都能成功，也没有任何数学理论保证任何非线性方程组的解存在且唯一。所以使用有限元软件求解非线性问题中需要引起注意，特别是材料出现软化段的时候。类似实际试验中材料应力-应变曲线测定，当材料出现软化段的时候需要根据变形加载而不能根据力加载，对于数值模拟也是类似道理，对于软化材料最好根据应变率计算应力率而不是根据应力率计算应变率。黄克智[10]著作中详细解释了这一点。

2. 非线性本构关系

本构关系是指材料的应力-应变关系，有限元计算中需要根据根据本构关系导出单元的切线刚度矩阵进而集成总成刚度矩阵 $\boldsymbol{K}^{\mathrm{ep}}$ 用以求解方程(1)。非线性本构关系有很多中，例如超弹性、塑性、粘性、损伤等。Bonet[9]等给出了十来种常用的非线性材料的本构计算模型。更复杂的固体本构模型见[10]。这些非线性本构关系可以放在一个统一的框架之下，本文试图以统一的方法简要介绍材料非线性。

图 5 是一个典型的塑性材料应力-应变曲线。图 6 展现了粘塑性材料的几种典型表现。

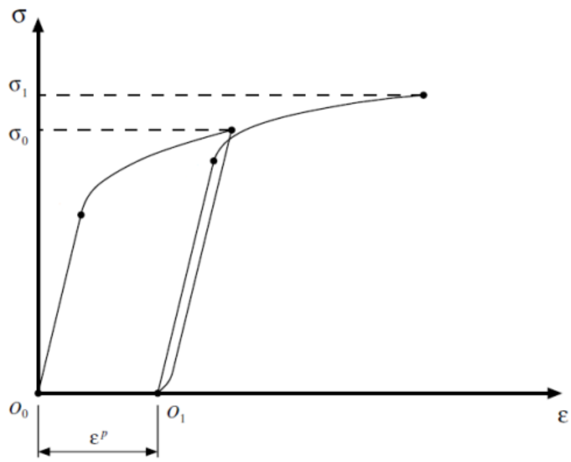


图 5　典型弹塑性应力-应变曲线

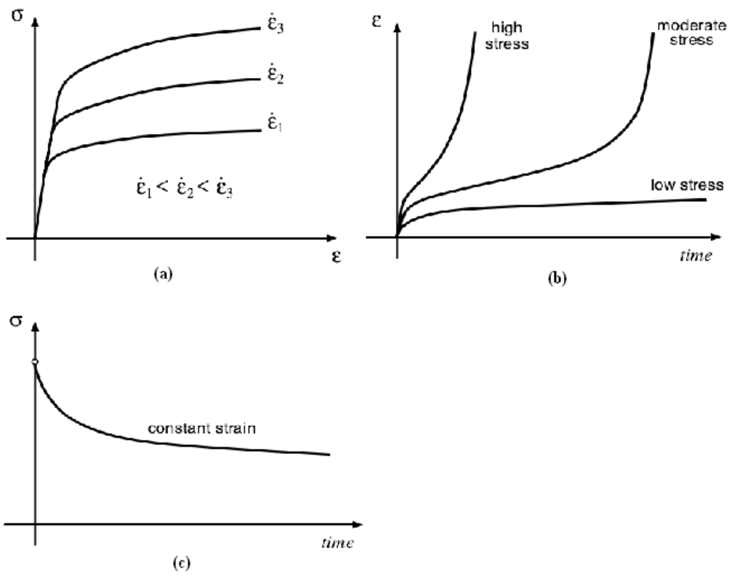


图 6 材料流变性的三种表现形式：（a）应变率强化；（b）徐变；（c）应力松弛

材料的应变ε可以分为两部分：弹性应变$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}$与不可恢复应变$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{p}}$。

$$\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}+\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{p}} \tag{2}$$

为了考虑时间的因素，塑性力学计算中通常用应变率应力率计算。非线性本构关系主要包括三个部分：屈服条件、流动法则和强化法则。

2.1. 屈服函数

材料是否处于塑性由屈服函数判断：

$$\Phi\left(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H}\right)=0 \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{H}=\left(H_1,H_2,\cdots\right)$ 为后继屈服条件中的内变量，表征了材料的强化、粘性等各种复杂性质，其表达形式也可以非常复杂。塑性力学中常用的 Tressca 屈服准则和 Mises 屈服准则是 $\varPhi(\ )$ 的两种特殊形式。Mises 屈服准则比 Tressca 屈服准则用得更多，由于 Mises 屈服与金属拉伸试验结果吻合得更好，而且其函数形式比较光滑。Mises 屈服准则为：

$$\varPhi_{\text{Mises}}\left(\sigma\right)=\sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}s_{ij}}-\sigma_y \tag{4}$$

其中 s_{ij} 是应力偏量，σ_y 是单轴屈服应力。

$\varPhi(\ )$ 是一个非正的函数，即表示材料应力状态的应力点只能位于 $\varPhi(\ )$ 内或 $\varPhi(\ )$ 上：位于 $\varPhi(\ )$ 内则材料处于弹性状态，位于 $\varPhi(\ )$ 上则材料处于塑性状态。$\varPhi(\ )\leq 0$ 也称为一致性原则。

材料的加载-卸载条件为：

$$\begin{aligned}&\varPhi(\ )<0\Rightarrow\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p=0,\ \text{弹性状态}\\&\varPhi(\ )=0\Rightarrow\begin{cases}\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p=0,\ \text{卸载}\\\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p\neq 0,\ \text{加载}\end{cases}\end{aligned} \tag{5}$$

2.2. 流动法则

塑性力学中通常把塑性流动看成是塑性流动势 $\Psi\left(\sigma,\boldsymbol{H}\right)$ 函数的梯度方向。

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p=\dot{\gamma}\frac{\partial\Psi\left(\sigma,\boldsymbol{H}\right)}{\partial\boldsymbol{\sigma}}=\dot{\gamma}\boldsymbol{N} \tag{6}$$

$\dot{\gamma}$ 为标量塑性流动率，是一个非负的标量，$\boldsymbol{N}=\partial\Psi\left(\sigma,\boldsymbol{H}\right)/\partial\boldsymbol{\sigma}$ 为塑性流动方向。

流动势借鉴了有势场的概念，$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p$ 在空间是一个向量场，而 $\Psi\left(\sigma,\boldsymbol{H}\right)$ 则是一

个标量场，比向量场更容易描述与计算。$\Psi(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})$对于描述塑性流动法则具有至关重要的作用，不同的塑性流动模型对应截然不同类型的$\Psi(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})$。

流动法则分为两大类：关联流动(associated flow)与非关联流动(non-associated flow)。关联流动中使用了屈服函数$\Phi(\ )$作为流动势$\Psi(\ )$。关联流动通常用来描述由位错诱发的塑性流动，ABAQUS®中除铸铁外的一般金属与 Cam-clay 土力学模型采用了关联流动的格式。非关联流动在处理摩擦型塑性流动方面比关联流动更好，Mohr-Coulomb, Drucker-Prager 等模型使用了非关联流动。使用关联流动集成的刚度矩阵$\boldsymbol{K}^{\mathrm{ep}}$是对称矩阵，在材料不出现软化现象的时候$\boldsymbol{K}^{\mathrm{ep}}$还是正定的，容易求解。而非关联流动集成的刚度矩阵是不对称的，容易导致求解失败。

除了以上与率不相关的塑性流动外，粘塑性计算中也需要定义流动法则，粘性流动率$\dot{\gamma}$通常是与应力相关的。常见的粘塑性流动法则有：

Bingham 模型：

$$\dot{\gamma}=\begin{cases}\Phi_{\text{Mises}}/k, & \Phi_{\text{Mises}}\geq 0\\ 0, & \Phi_{\text{Mises}}<0\end{cases} \tag{7}$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p}=\dot{\gamma}\frac{\partial\Phi_{\text{Mises}}}{\partial\boldsymbol{\sigma}} \tag{8}$$

其中k为系数，由试验测得。Bingham 模型采用了与 Mises 屈服准则关联的流动模式，且流动速率与应力成正比。

Norton 模型：

$$\dot{\gamma}=\left[\frac{\sqrt{\frac{3}{2}s_{ij}s_{ij}}}{k_1}\right]^{k2} \tag{9}$$

其中k_1k_2为模型参数。与 Bingham 模型不同，Norton 模型中$\dot{\gamma}$与应力强度为非线性关系，且材料的屈服强度为 0。

强化法则

硬化法则描述描述材料屈服判据中参数 $\boldsymbol{H}$ 的演化规律。硬化法则通常也描写成与时间相关的率形式，如式(10)所示。

$$\dot{H}_i = \dot{\gamma} h_i\left(\boldsymbol{\sigma}, H_1, H_2, \cdots\right) \tag{10}$$

与流动法则相比，强化法则更复杂，强化可以是应变相关(strain hardening)，也可以是塑性功相关（work hardening)，因此强化法则与表征材料状态的内变量密切相关。以下是两种简单的强化法则：

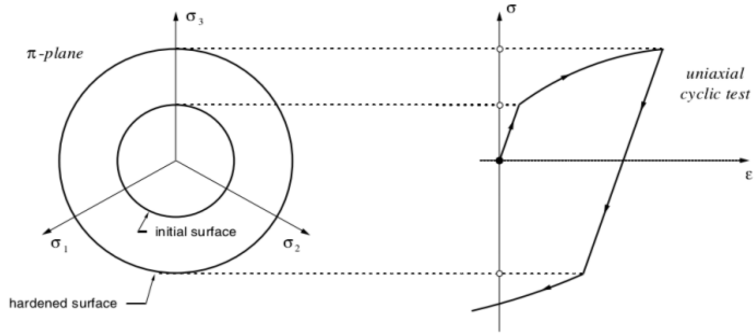


图 7　各项同性强化

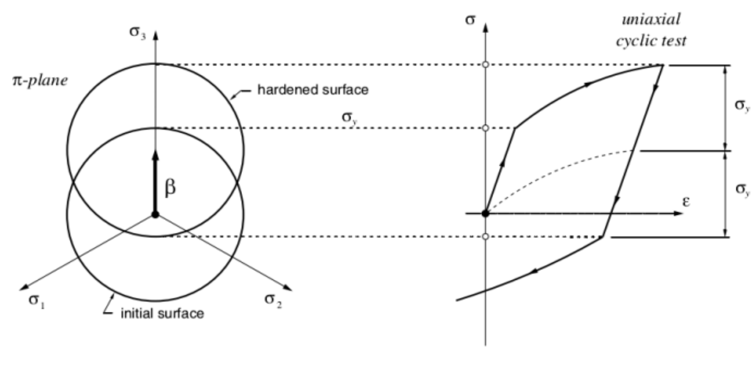


图 8　随动强化模型（Bauschinger 效应）

需要强调的是塑性力学教科书里经常提到德鲁克公设(Drucker postulate)并在此基础上根据一致性条件性条件可以直接消去 $\dot{\gamma}$ 得到应力-应变关系。德鲁克公设假设材料为硬化材料，后继屈服曲面（hardened surface）一直向外扩，对于软化材料而言，德鲁克公设不成立的前提下不能机械套用公式。

3. 本构关系积分

塑性流动(6)和硬化(10)都是用率的形式给出，与时间相关，所以还需要将式(6)和式(10)对时间积分以计算应变和应力，亦即消去时间项。计算积分有两个作用：一是更新应力应变的状态，二是将率形式本构关系转化为应力-应变切线刚度。

有限元计算中通常采用一种叫 Return-Mapping 的方法确定应力。Return-Mapping 的基本方法是：已知第 n 步状态，在确定第 $n+1$ 步状态的时候首先假设材料处于弹性状态，强化状态不变，给定应变增量 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$，则在弹性假设的前提下试算第 $n+1$ 步应力 $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{\mathrm{trial}}$ 与应变 $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{\mathrm{e\ trial}}$。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{\mathrm{e\ trial}} &= \boldsymbol{\varepsilon}_n^{\mathrm{e}} + \Delta\boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{\mathrm{trial}} &= \boldsymbol{\sigma}_n + \boldsymbol{D} : \Delta\boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{H}_{n+1}^{\mathrm{trial}} &= \boldsymbol{H}_n \end{aligned} \tag{11}$$

如果 $\Phi\left(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{\mathrm{trial}}, H_1, H_2, \cdots\right) < 0$，则说明材料处于弹性状态，假设成立，$\dot{\gamma} = 0$，使用弹性模量 $\boldsymbol{D}$ 集成切线刚度矩阵。如果 $\Phi\left(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}^{\mathrm{trial}}, H_1, H_2, \cdots\right) \geq 0$ 则说明材料处于塑性状态，假设不成立，需要根据塑性流动调整 $\Phi(\ )$，使之回到 $\Phi(\ ) = 0$ 的状态，如图 9 所示，从 Return-Mapping 的字面意义也不难理解这一点。

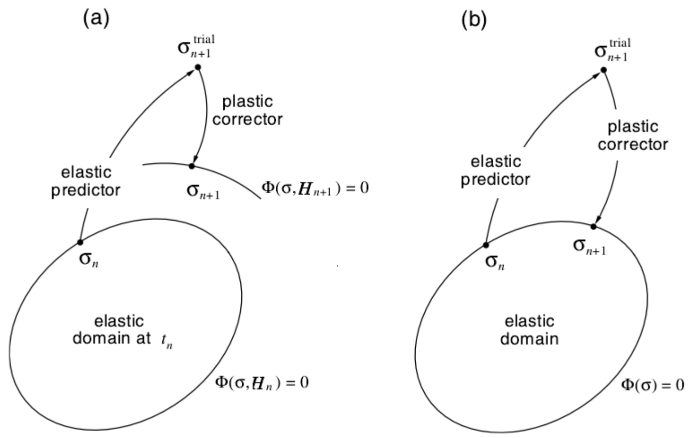


图 9　Return-Mapping 算法示意

根据式(2)、式(10)和式(3)可以连列一个非线性方程组：

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{\mathrm{e}}-\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{\mathrm{e\ trial}}+\Delta\gamma\boldsymbol{N}=0\\
&\boldsymbol{H}_{n+1}-\boldsymbol{H}_{n+1}^{\mathrm{trial}}-\Delta\gamma\boldsymbol{h}_{n+1}=0\\
&\Phi\left(\boldsymbol{\sigma}_{n+1},\boldsymbol{H}\right)=0
\end{aligned}
\tag{12}
$$

方程组(12)中有三个未知数$\Delta\gamma$、$\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{\mathrm{e}}$和$\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$。这个方程组可以使用数值方法解出，积分方案可以选择后退 Eular 法、前进 Eular 法等。式(12)中$\Delta\gamma$没有写成$\int_t\dot{\gamma}dt$的形式是因为在数值积分中往往需要假设$\Delta\gamma$的形式，用加权求和的方式代替积分。相关文献都有相关数值算法详细的介绍，这儿略去。对于一些常见的本构模型，方程组(12)经常有解析解，可以使用符号计算工具 MATHEMATICA®、MAPLE®等计算。

由方程组(12)的结果可以得到弹塑性本构关系

$$
\boldsymbol{D}^{ep}=\frac{\partial\left(\boldsymbol{\sigma}_{n+1}-\boldsymbol{\sigma}_{n}\right)}{\partial\left(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}-\boldsymbol{\varepsilon}_{n}\right)}
\tag{13}
$$

在本构关系积分的过程中式(1)中内力得到了更新，此外通过D^{ep}集成了新的刚度矩阵$\boldsymbol{K}^{\mathrm{ep}}$。

4. ABAQUS®软件用户子程序 UMAT

ABAQUS®提供了丰富的用户子程序接口，用户可以通过 FORTRAN 语言对 ABAQUS®进行二次开发。与材料相关的子程序 UMAT 格式为：

SUBROUTINE UMAT(STRESS,STATEV,DDSDDE,SSE,SPD,SCD…)

其中，

STRESS 为应力向量，在分析中用户子程序中必须根据弹塑性关系更新应力向量；

DDSDDE 切线应力-应变刚度矩阵(Jacobian matrix)，相当于式(13)。在 ABAQUS®中使用的应变为工程应变；

STATEV 存储与加载历史(solution-dependent)相关的状态变量；

SSE, SPD, SCD 三个值分别给出了 Specific elastic strain energy, plastic dissipation, 和“creep” dissipation。

ABAQUS®官方帮助文档中提供了一个使用 UMAT 开发粘弹性模型的例子，卢剑锋、庄茁[11]给过一个 Johnson-Cook 的实例。宋恒旭[12]等写了一个用 VUMAT 开发的复合材料冲击损伤模型。

5. 结论

材料非线性是一个比较复杂的问题，但是把握住固体力学的三个要素就不难理解。一是平衡条件，这一点通过非线性迭代法实现，如式(1)所示；二是几何条件，即应变-位移关系，这一点有限元选择好插值函数以后自动满足；三是应力-应变关系，这一条件通过率型本构关系积分实现满足。

6. 参考文献

1. *Owen, D.R. and E. Hinton, Finite elements in plasticity. Vol. 271. 1980: Pineridge Press Swansea.*
2. *de Souza Neto, E.A., D. Peric, and D.R.J. Owen, Computational methods for plasticity: theory and applications. 2011: John Wiley & Sons.*
3. *Zienkiewicz, O.C. and R.L. Taylor, The Finite Element Method: Solid Mechanics. Vol. 2. 2000: Butterworth-heinemann.*
4. *Belytschko, T., B. Moran, and W.K. Liu, Nonlinear finite element analysis for continua and structures. Vol. 1. 1999: Wiley.*
5. *Simo, J. and T. Hughes, Computational inelasticity. 1998. New York.*
6. *王勖成, 有限单元法. 2003: 清华大学出版社有限公司.*

7. *Crisfield, M.A., A fast incremental/iterative solution procedure that handles "snap-through". Computers & Structures, 1981. 13(1): p. 55-62.*

8. *Memon, B.-A. and X.-z. Su, Arc-length technique for nonlinear finite element analysis. JOURNAL-ZHEJIANG UNIVERSITY SCIENCE, 2004. 5(5): p. 618-628.*

9. *Bonet, J., Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis. 1997: Cambridge university press.*

10. *黄克智 and 黄永刚, 高等固体力学. 2013: 清华大学出版.*

11. *卢剑锋、庄茁. 用户材料子程序实例 —Johnson-Cook 金属本构模型.*

12. 宋恒旭. *复合材料低速冲击损伤研究及等效模型的应用.* 清华大学硕士学位论文. 2012 年.