

一种显式子步应力点积分算法及其 在 SMA 数值模拟中的应用*

陈曦¹, 张建², 刘建坤¹

(1. 北京交通大学 土木建筑工程学院,北京 100044;
2. 东南大学 城市工程科学技术研究院,南京 210096)

摘要: 形状记忆合金(shape memory alloys,简称 SMA)具有复杂的热力本构关系,为了模拟 SMA 及其组合结构复杂的受力和变形行为,在数值模拟中需要采用可靠且高效的应力点积分算法.隐式应力点回映算法已经成功应用于形状记忆合金的数值模拟,但在复杂加载条件下,荷载增量较大时有可能导致整体非线性迭代求解不收敛.推广了局部误差控制的显式子步积分算法,首次将其应用于形状记忆合金及其组合结构这类热力相变问题的应力点积分,并通过数值算例对所提算法和隐式应力点回映算法进行了比较.数值结果表明:对于大规模数值模拟和计算,整体子步步数决定着总体计算时间;所提出的修正 Euler 自动子步方案可以有效减少整体子步步数,在保证相同计算精度的前提下能够大幅提高有限元计算效率,因而更适合大规模形状记忆合金智能结构的数值模拟.

关键词: 形状记忆合金; 智能结构; 应力点积分; 显式子步积分方案; 相变

中图分类号: O302 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2013.06.004

引 言

形状记忆合金(shape memory alloys,简称 SMA)是一种奇特工程材料,不仅能够在加热后恢复到受力变形前的形状(即 SME),还具有伪弹性或超弹性、高刚度、较好的生物兼容性和抗腐蚀性等特点,使其在许多科学和工程领域都获得了应用^[1].例如,Burton 等^[2]已成功将 SMA 材料应用于自愈式结构构件.王社良等^[3]将形状记忆合金应用于拉索来被动控制结构,并进行了相应的地震分析.刘爱荣等^[4]对形状记忆合金的热力学行为进行了模拟,研究了形状记忆合金纤维复合材料在多种荷载作用下的力学行为.为了克服 Tanaka 系列模型不能恰当描述完全马氏体状态时 SMA 的力学行为,朱祎国等^[5]基于 Tanaka 一维 SMA 模型发展出新的 SMA 本构模型,通过数值实验验证了模型的有效性.匡亚川和欧进萍^[6]利用形状记忆合金配制了智能混凝土梁,通过试验研究了形状记忆合金智能混凝土梁的变形规律及其影响因素.陈海泉等^[7]提出一种形状记忆合金拉索耗能器复合普通橡胶支座的新型建筑结构隔震体系,对 8 层

* 收稿日期: 2013-01-18; 修订日期: 2013-05-15

基金项目: 国家“973”项目课题(2012CB026104); 中央高校基本科研业务费资助项目(2013JBM059); 教育部博士点新教师基金资助项目(20110009120020)

作者简介: 陈曦(1977—),男,辽宁人,副教授,博士(通讯作者. E-mail: xichen_geo@gmail.com).

隔震建筑进行了时程仿真分析。夏开明等^[8]根据现时构型 Lagrange 法大变形理论,采用三维有限元分析方法研究了 SMA 的超弹性力学,通过数值模拟 SMA 单轴拉伸和悬臂弯曲梁证实了所采用的 SMA 本构模型和大变形有限元方程能够有效地模拟出 SMA 超弹性变形滞回环。

早期的 SMA 模型都属于唯象模型,如 Tanaka 模型^[9]、Liang 和 Rogers 模型^[10]、Boyd 和 Lagoudas 模型^[11],都可以统一到 Lagoudas 等的三维热动力学模型^[12],而各种唯象模型主要的区别在于演进或硬化法则不同。对 SMA 及其组合结构进行数值模拟时,主要困难之一是对形状记忆合金复杂热力学本构行为的建模和相关的应力计算^[13]。为了模拟 SMA 复杂的受力和变形行为,需要采用高效的应力点积分算法^[14]。通常,应力点算法可以分为应力回映算法和直接向前 Euler 算法两类。应力回映算法已经成功应用于 SMA 及其组合结构系统。子步积分算法是基于向前 Euler 方案的另一类常用的积分方法,在计算岩土领域获得了很好的应用^[15-16]。应力点回映算法已经成功应用于 SMA 及其组合结构,但荷载步过大时可能引起不收敛问题。推广了子步积分算法,首次将其成功应用于复杂荷载条件下 SMA 复合结构的热力及固体相变本构积分计算中,并与 Lagoudas 等^[12]提出的回映算法进行了比较。

1 SMA 热力学行为的数值建模

在形状记忆合金的数值模拟过程中,需要确定所采用的材料参数、本构关系和材料演进或硬化法则。根据 Lagoudas 等^[12]的统一三维模型,多晶体的 Gibbs 单位自由能可表示如下:

$$G = -\frac{1}{2\rho} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{C}(\eta) : \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{\rho} \boldsymbol{\sigma} : [\boldsymbol{\alpha}(\eta) \Delta T + \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{in}}] + c \left[\Delta T - T \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) \right] - s_0 T + g_0 + h(\eta), \quad (1)$$

式中,具体变量及参数详见文献[12]。根据热动力学,相变函数 F 可定义如下:

$$F(\boldsymbol{\sigma}, T, \eta) = \text{sign}(\dot{\eta}) (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{A} - \rho \partial_{\eta} G) - \pi, \quad (2)$$

这里,定义 $\partial_{\gamma} X = \partial X / \partial \gamma$ 。由于应力变化既可能由应变变化引起,又可能由温度变化引起,则有

$$d\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{L} : d\boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\Xi} : dT, \quad (3)$$

式中, \mathbf{L} 为有效切线刚度矩阵, $\boldsymbol{\Xi}$ 为有效切线热模张量,具体可表达为

$$\mathbf{L}(\boldsymbol{\sigma}, T, \eta) = \mathbf{C}^{-1} - \text{sign}(\dot{\eta}) \mathbf{a} \otimes \mathbf{a} / \beta, \quad (4)$$

$$\boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\sigma}, T, \eta) = -\mathbf{L} : \boldsymbol{\alpha} - \text{sign}(\dot{\eta}) \mathbf{a} \partial_{\eta} F / \beta, \quad (5)$$

式中, $\mathbf{a} = \mathbf{C}^{-1} : \partial_{\sigma} F$, $\beta = \text{sign}(\dot{\eta}) \partial_{\sigma} F : \mathbf{a} - \partial_{\eta} F$, 其中 $\partial F / \partial \eta$ 的计算根据相变动力学而不同。

2 SMA 热力学本构关系的积分算法

对于给定应变增量和温度增量,首先假定无相变发生,弹性应力增量可通过下式计算:

$$\Delta \boldsymbol{\sigma}_j^e = \mathbf{C}_j^{-1} : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_j - \boldsymbol{\alpha}_j \Delta T_j). \quad (6)$$

将试算应力 $\boldsymbol{\sigma}_{j+1}^{\text{trial}} = \boldsymbol{\sigma}_j + \Delta \boldsymbol{\sigma}_j^e$ 代入相变函数,并采用 Kuhn-Tucker 条件评价应力状态。计算 $F(\boldsymbol{\sigma}_j)$ 和 $F(\boldsymbol{\sigma}_{j+1}^{\text{trial}})$, 若下式成立,表明相变已经发生,

$$F(\boldsymbol{\sigma}_j) < 0 \text{ 并且 } F(\boldsymbol{\sigma}_{j+1}^{\text{trial}}) > 0. \quad (7)$$

当式(7)中的条件满足时,需求解下面的初值问题:

$$d_{\gamma} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{L}(\boldsymbol{\sigma}, T, \eta) \Delta \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\sigma}, T, \eta) \Delta T, \quad (8)$$

式中, $\gamma \in [0, 1]$ 为伪时间。对式(8)积分,需要计算下面的相变应变率:

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^{\text{ln}} = \mathbf{A}\dot{\boldsymbol{\eta}}. \quad (9)$$

因为张量 \mathbf{A} 在 $\boldsymbol{\eta}$ 增量范围内是变化的,从 k 到 $k+1$ 范围内进行积分,加权格式的相变应变演化可表示为

$$\boldsymbol{\epsilon}_{j+1,k+1}^{\text{ln}} = \boldsymbol{\epsilon}_{j+1,k}^{\text{ln}} + [(1 - \varpi)\mathbf{A}_{j+1,k} + \varpi\mathbf{A}_{j+1,k+1}](\boldsymbol{\eta}_{j+1,k+1} - \boldsymbol{\eta}_{j+1,k}), \quad (10)$$

其中,加权参数 $\varpi \in [0, 1]$, 式(10)可看作广义梯形算法或中点算法。

2.1 应力回映算法

应力回映算法主要有最近点回映算法和截平面算法^[14]。两种算法中,相变修正都从试算应力状态 $\boldsymbol{\sigma}_{j+1}^{\text{trial}}$ 开始,目标是找到满足相变一致性条件的应力状态 $(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\epsilon}^{\text{ln}})$ 。最近点回映算法的优势在于它能够准确线性化,并通过一致切线刚度矩阵来获得二次收敛速度。然而,最近点回映算法需要计算相变流梯度和硬化法则,对于复杂本构关系计算比较困难和繁琐。相反,类属于约束优化凸面截平面方法中的截平面算法可规避相变流梯度和硬化法则的计算。

2.2 显式子步应力点积分

显式子步应力点积分是另一种广为使用的数值积分方法^[15-16]。对式(9)的相变应变率进行积分,最简单的方法是一阶 Euler 方法。然而只有当增量足够小时,Euler 方法才是精确的,因此 Euler 方法经常与子步方案结合使用。

2.2.1 交叉点或初始相变应力状态的确定

显式向前 Euler 子步算法需要评价应力路径与相变函数面的交叉点。当式(7)条件满足(即相变发生)时,首先需要确定比例 $1 - \chi$, 使得

$$\Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j = (1 - \chi_\epsilon)\Delta \boldsymbol{\epsilon}_j, \quad \Delta \tilde{T}_j = (1 - \chi_T)\Delta T_j. \quad (11)$$

设 $\chi_\epsilon = \chi_T = \chi$, 则相变开始时的应力状态和温度可通过下式确定:

$$\boldsymbol{\sigma}(\chi) = \boldsymbol{\sigma}_{j+1,0} = \boldsymbol{\sigma}_j + \chi \Delta \boldsymbol{\sigma}_j^e, \quad T(\chi) = T_{j+1,0} = T_j + \chi \Delta T_j, \quad (12)$$

可见,实际上子步方案仅应用于剩余 $1 - \chi$ 部分。为了确定交叉点参数 χ ,最简单的方法是线性插值,或采用其它非线性迭代方法,如修正 Regula-Falsi (MRF) 法。

2.2.2 子步方案

基于收敛值 χ_{l+1} , 可得到相变初始的应力状态 $\boldsymbol{\sigma}_{j+1,0}$ 和相应的温度 $T_{j+1,0}$ 。接下来需要更新应力状态 $\boldsymbol{\sigma}_{j+1,0}$ 使其达到收敛应力状态 $\boldsymbol{\sigma}_{j+1}$ 。很明显,仅进行下面一步更新通常是不够的,

$$\Delta \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_j = \mathbf{L}(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k}, T_{j+1,k}, \boldsymbol{\eta}_j) : \Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j + \boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k}, T_{j+1,k}, \boldsymbol{\eta}_j) : \Delta \tilde{T}_j. \quad (13)$$

因为切线刚度矩阵 $\mathbf{L}(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k}, T_{j+1,k}, \boldsymbol{\eta}_j)$ 和切线热模张量 $\boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k}, T_{j+1,k}, \boldsymbol{\eta}_j)$ 只能在一点进行评价,而在增量步 $\Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j$ 和 $\Delta \tilde{T}_j$ 上,两个张量具有较强的非线性。在增量区间进行积分,则有

$$d_\gamma \tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{L}(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k}, T_{j+1,k}, \boldsymbol{\eta}_j) : \Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j + \boldsymbol{\Xi}(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k}, T_{j+1,k}, \boldsymbol{\eta}_j) : \Delta \tilde{T}_j, \quad (14)$$

其中, γ 为伪时间。对式(14)进行积分,最简单的方法是继续细分增量 $\Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j$ 和 $\Delta \tilde{T}_j$ 。通过子步 Euler 积分方案,剩余应变增量 $\Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j$ 和剩余温度增量 $\Delta \tilde{T}_j$ 可以细分为一系列子步增量,即

$$\delta \boldsymbol{\epsilon}_{j,k} = \delta \gamma_k \Delta \tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_j, \quad \delta T_{j,k} = \delta \gamma_k \Delta \tilde{T}_j, \quad (15)$$

这里, δ 表示细化的子步,用以区分增量符号 Δ 。伪时间子步增量 $\delta \gamma_k$ 可表示如下:

$$\delta \gamma_k = \begin{cases} \frac{1}{n_{\text{SS}}}, & \text{均匀步方案,} \\ R_{j+1,k} \leq R_{\text{tol}}, & \text{自动化方案,} \end{cases} \in [0, 1], \quad (16)$$

其中, n_{SS} 为子步总数, $R_{j+1,k}$ 为相对误差, R_{tol} 为允许值。无论采用上述哪种方案,伪时间增量之

和应满足:

$$\sum_{k=0}^{n_{SS}-1} \delta\gamma_k = 1. \quad (17)$$

自动子步方案的目标是在保证计算误差的前提下,尽可能减少子步数,这需要采用适当的误差控制方案才能得以实现.

给定应变增量 $\delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k}$ 和温度增量 $\delta T_{j,k}$, 马氏体体积分数的子增量可通过下式计算:

$$\delta\eta_{j,k} = \frac{\partial_{\sigma} F_{j+1,k} : \mathbf{C}_{j+1,k}^{-1} : \delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} - (\partial_{\sigma} F_{j+1,k} : \mathbf{C}_{j+1,k}^{-1} : \boldsymbol{\alpha}_{j+1,k} - \partial_T F_{j+1,k}) \delta T_{j,k}}{\text{sign}(\dot{\eta}) \partial_{\sigma} F_{j+1,k} : \mathbf{C}_{j+1,k}^{-1} : \partial_{\sigma} F_{j+1,k} - \partial_{\eta} F_{j+1,k}}. \quad (18)$$

根据显式向前 Euler 公式,相变应变子步增量为

$$\delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k}^{\text{In}} = \mathbf{A}_{j+1,k} \delta\eta_{j,k}. \quad (19)$$

内部状态变量和场变量 $\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{In}}, \boldsymbol{\varepsilon}, T$ 按增量步进行更新,而应力可更新如下:

$$\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k+1} = \mathbf{C}_{j+1,k+1}^{-1} [\boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k+1} - \boldsymbol{\alpha}_{j+1,k+1} (T_{j+1,k+1} - T_0) - \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k+1}^{\text{In}}]. \quad (20)$$

2.2.3 热应力更新方案

为了避免在整个增量步上使用常切线刚度和常切线模数矢量,需要将 $\Delta\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j$ 和 $\Delta\tilde{T}_j$ 进一步细分为更小的子步增量,然而这样的细化仍会导致误差的累积和应力漂移^[16]. 这里仅在每一增量步结束时,而不是每一子增量步结束时采用应力修正,所采用的修正与截平面修正方法一致. 假设将一漂移的应力状态 $(\boldsymbol{\sigma}, T, \boldsymbol{\eta})$ 修正到一新的应力状态 $(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, T, \tilde{\boldsymbol{\eta}})$, 使其位于或距离相变函数面足够近. 修正过程中,温度和总应变变量不变,截平面修正可通过下式给出:

$$\delta\boldsymbol{\sigma} = -\text{sign}(\dot{\eta}) \mathbf{C}^{-1} : \partial_{\sigma} F \delta\boldsymbol{\eta}. \quad (21)$$

很明显,下一步需要使修正的应力状态满足一致性条件. 使用一阶 Taylor 展开,可得

$$\tilde{F} = F(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, T, \tilde{\boldsymbol{\eta}}) \approx F + \partial_{\sigma} F \delta\boldsymbol{\sigma} + \partial_{\eta} F \delta\boldsymbol{\eta} = 0. \quad (22)$$

因此 $\boldsymbol{\eta}$ 和相变应变可通过下式进行更新:

$$\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{\eta} + \delta\boldsymbol{\eta}, \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{In}} = \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{In}} + \delta\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{In}}, \quad (23)$$

修正过程需要持续到 $|F(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, T, \tilde{\boldsymbol{\eta}})| \leq Y_{\text{tol}}$ 为止.

2.2.4 具有误差控制方案的广义 Euler 方法

通过加权两个连续步的切线张量,可以进一步改善向前 Euler 积分法的精度,进而得到广义 Euler 积分方法,其中应力可以根据下式进行更新:

$$\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k+1} = \boldsymbol{\sigma}_{j+1,k} + [(1 - \omega) \mathbf{L}_{j+1,k} + \omega \mathbf{L}_{j+1,k+1}] : \delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} + [(1 - \omega) \boldsymbol{\Xi}_{j+1,k} + \omega \boldsymbol{\Xi}_{j+1,k+1}] : \delta T_{j,k}, \quad (24)$$

这里, ω 为加权因子. $\omega = 0$ 对应 Euler 方法, $\omega = 1/2$ 对应目前较为流行的修正 Euler (ME) 方法. 在 Euler 方法中

$$\eta_{j+1,k+1} = \eta_{j+1,k} + \delta \bar{\eta}_{j,k}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k+1}^{\text{In}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k}^{\text{In}} + \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,k}^{\text{In}}, \quad (25)$$

这里, $\delta \bar{\eta}_{j,k} = \delta\eta_{j,k}$ 可通过式(18)计算, $\delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,k}^{\text{In}} = \delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k}^{\text{In}}$ 可通过式(19)计算, $\delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{j,k} = \mathbf{L}_{j+1,k} : \delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} + \boldsymbol{\Xi}_{j+1,k+1} : \delta T_{j,k}$. 在广义 Euler 方法中,第二步的应力增量和内部变量增量是基于一步 Euler 更新的应力和变量计算的,即

$$\delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,k} = \mathbf{L}_{j+1,k+1} : \delta\boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} + \boldsymbol{\Xi}_{j+1,k+1} : \delta T_{j,k}, \quad (26)$$

$\delta \bar{\eta}_{j,k}$ 和 $\delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,k}^{\text{In}}$ 则分别根据式(18)和式(19)计算,但所有包括 F, \mathbf{C} 和 $\boldsymbol{\alpha}$ 在内的累积量或总量都是基于向前 Euler 更新的应力 $(\boldsymbol{\sigma}_{j+1,k+1}, T_{j+1,k+1}, \boldsymbol{\eta}_{j+1,k+1})$ 计算的. 广义 Euler 方法中,应力和内

部变量可以按下式更新:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{j+1,k+1} = \boldsymbol{\sigma}_{j+1,k} + [(1 - \omega) \delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{j,k} + \omega \delta \bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}_{j,k}], \quad (27)$$

$$\hat{\eta}_{j+1,k+1} = \eta_{j+1,k} + [(1 - \omega) \delta \bar{\eta}_{j,k} + \omega \delta \bar{\bar{\eta}}_{j,k}], \quad (28)$$

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j+1,k+1}^{\text{tn}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k}^{\text{tn}} + [(1 - \omega) \delta \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j,k}^{\text{tn}} + \omega \delta \bar{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}}_{j,k}^{\text{tn}}], \quad (29)$$

这里, 累积应变和温度可按下式进行更新:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_{j+1,k+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k} + \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j,k}, \quad (30)$$

$$\hat{T}_{j+1,k+1} = T_{j+1,k+1} = T_{j+1,k} + \delta T_{j,k}. \quad (31)$$

值得提及的是, 在变量更新过程中, 马氏体体积分数 η 严格限定于 $[0, 1]$ 范围内, 非法的 η 值必须被处理. 与式(27)~(29)相对应的局部误差应通过下式估算:

$$\mathbf{E}_{j+1,k+1}^{(\boldsymbol{\sigma})} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{j+1,k+1} - \boldsymbol{\sigma}_{j+1,k+1} = \omega (\delta \bar{\bar{\boldsymbol{\sigma}}}_{j+1,k} - \delta \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{j+1,k}), \quad (32)$$

$$\mathbf{E}_{j+1,k+1}^{(\eta)} = \hat{\eta}_{j+1,k+1} - \eta_{j+1,k+1} = \omega (\delta \bar{\bar{\eta}}_{j+1,k} - \delta \bar{\eta}_{j+1,k}), \quad (33)$$

式中, $\mathbf{E}^{(\cdot)}$ 或 $E^{(\cdot)}$ 表示给定矢量或数量的误差. 因此对于每一子步增量, 相对误差定义如下:

$$R = \max \{ \|\mathbf{E}^{(\boldsymbol{\sigma})}\|_2 / \|\hat{\boldsymbol{\sigma}}\|_2, \|\mathbf{E}^{(\eta)}\|_2 / \|\hat{\eta}\|_2 \}, \quad (34)$$

其中, $\|\cdot\|_2$ 为欧氏模或二模. 当满足 $R_{j+1,k+1} \leq R_{\text{tol}}$, 接受当前的伪时间子步增量 $\delta\gamma_k$, 否则, $\delta\gamma_k = 0$ 表明拒绝 $\delta\gamma_k$, 并且需要恢复所有第 k 步的状态或场变量. 然而, 不管是否接受 $\delta\gamma_k$, 下一步的子增量可以通过 $\delta\gamma_{k+1} = \xi \delta\gamma_k$ 计算, 标度因子 ξ 可通过下式计算:

$$\xi = 0.8 \sqrt{R_{\text{tol}} / R_{j+1,k+1}}, \quad (35)$$

ξ 主要的作用在于对下一子增量步进行收缩或放大. 为了防止下一子增量步的突然改变, 可对 ξ 进行限制, 如 $\xi \in [0.1, 2.0]$. 算法 1 为修正 Euler 自动子步算法.

算法 1 显式修正 Euler 自动子步算法, ME ($R_{\text{tol}}, N_{\text{max}}$)

- 1) 确定应力增量与相变函数面的交叉点, 即比例因子 χ ;
- 2) 通过 $\boldsymbol{\sigma}_{j+1,0}(\chi) = \boldsymbol{\sigma}_j + \chi \Delta \boldsymbol{\sigma}_j^e$ 来确定相变开始时的应力状态, 剩余应变或温度增量可按下式计算 $\Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j = (1 - \chi) \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_j$, $\Delta \tilde{T}_j = (1 - \chi) \Delta T_j$; 在交叉点处, 设 $\boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,0}^{\text{tn}} = \boldsymbol{\varepsilon}_j^{\text{tn}}$ 且 $\eta_{j+1,0} = \eta_j$;
- 3) Do While $\sum_k \delta\gamma_k < 1$ (or $k = 1$ to N_{max});

4) 计算应变和温度的子步增量 $\delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} = \delta\gamma_k \Delta \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_j$, $\delta T_{j,k} = \delta\gamma_k \Delta \tilde{T}_j$;

5) Do Ieu = 1 to IMeth;

6) 马氏体体积分数 η 的子增量:

$$\delta \eta_{j,k} = \frac{\partial_{\boldsymbol{\sigma}} F_{j+1,k} : \mathbf{C}_{j+1,k}^{-1} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} - (\partial_{\boldsymbol{\sigma}} F_{j+1,k} : \mathbf{C}_{j+1,k}^{-1} : \boldsymbol{\alpha}_{j+1,k} - \partial_T F_{j+1,k}) \delta T_{j,k}}{\text{sign}(\dot{\eta}) \partial_{\boldsymbol{\sigma}} F_{j+1,k} : \mathbf{C}_{j+1,k}^{-1} : \partial_{\boldsymbol{\sigma}} F_{j+1,k} - \partial_{\eta} F_{j+1,k}};$$

7) If $(\eta_{j+1,k} + \delta \eta_{j,k} \in [0, 1])$ Then;

8) 更新 $\mathbf{C}_{j+1,k}$, $\boldsymbol{\alpha}_{j+1,k}$, $\boldsymbol{\Lambda}_{j+1,k}$, $\mathbf{L}_{j+1,k}$, $\boldsymbol{\Xi}_{j+1,k+1}$;

9) If (Ieu == 1) $\boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k+1} = \boldsymbol{\varepsilon}_{j+1,k} + \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j,k}$;

$$T_{j+1,k+1} = T_{j+1,k} + \delta T_{j,k};$$

10) 子步增量 $\delta \eta_{\text{Ieu}} = \delta \eta_{j,k}$; $\delta \boldsymbol{\varepsilon}_{\text{Ieu}}^{\text{tn}} = \boldsymbol{\Lambda}_{j+1,k} \delta \eta_{\text{Ieu}}$;

$$\delta \boldsymbol{\sigma}_{\text{Ieu}} = \mathbf{L}_{j+1,k} : \delta \boldsymbol{\varepsilon}_{j,k} + \boldsymbol{\Xi}_{j+1,k+1} : \delta T_{j,k};$$

11) Else;

12) 处理非法的 η 值;

- 13) End If;
- 14) End Do;
- 15) 更新应力和状态变量;
- 16) If (IMeth = 1) Then;
- 17) $\eta_{j+1,k+1} = \eta_{j+1,k} + \delta\eta_1$; $\sigma_{j+1,k+1} = \sigma_{j+1,k} + \delta\sigma_1$; $\epsilon_{j+1,k+1}^{ln} = \epsilon_{j+1,k}^{ln} + \delta\epsilon_1^{ln}$;
- 18) Else If (IMeth = 2) Then;
- 19) $\hat{\eta}_{j+1,k+1} = \eta_{j+1,k} + (\delta\eta_1 + \delta\eta_2)/2$; $\hat{\sigma}_{j+1,k+1} = \sigma_{j+1,k} + (\delta\sigma_1 + \delta\sigma_2)/2$;
 $\hat{\epsilon}_{j+1,k+1}^{ln} = \epsilon_{j+1,k}^{ln} + (\delta\epsilon_1^{ln} + \delta\epsilon_2^{ln})/2$;
 $E_{j+1,k+1}^{(\eta)} = (\delta\eta_2 - \delta\eta_1)/2$; $E_{j+1,k+1}^{(\sigma)} = (\delta\sigma_2 - \delta\sigma_1)/2$; $E_{j+1,k+1}^{(\epsilon)} = (\delta\epsilon_2^{ln} - \delta\epsilon_1^{ln})/2$.
- 20) $R = \max \{ \|E^{(\sigma)}\|_2 / \|\hat{\sigma}\|_2, \|E^{(\eta)}\|_2 / \|\hat{\eta}\|_2 \}$, 检查 $R_{j+1,k+1} \leq R_{tol}$?
- 21) 计算 $\xi = 0.8 \sqrt{R_{tol}/R_{j+1,k+1}}$;
- 22) End If;
- 23) End Do;
- 24) 进行应力修正.

这里, IMeth 为 Euler 法的标识符, IMeth=1 对应一步 Euler 法, IMeth=2 对应修正 Euler 法.

3 SMA 智能结构的数值算例

采用 ABAQUS 提供的用户材料模型接口程序 UMAT, 编制了相应的应力积分算法.

3.1 精度验证

表 1 SMA 的材料参数

Table 1 Material parameters of SMA

material parameters	physical meaning	example 1	example 2
ρ	material density	6 450 kg/m ³	6 450 kg/m ³
E_M/E_A	effective Young's modulus of martensite/austenite	30/67 GPa	30/70 GPa
ν_M/ν_A	Poisson's ratio of austenite/martensite	0.33	0.33
α_M/α_A	thermal expansion coefficient of austenite/martensite	$2.0 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$	$2.2 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$
M_s/M_f	martensite start/finish temperature	291/275 K	291/271 K
A_s/A_f	austenite start/finish temperature	300/322 K	295/315 K
$\epsilon_L^+(\epsilon_L^-)$	maximum uniaxial phase transformation strain	0.045	0.05

算例 1 给出一个受拉长条形 SMA, 其模型材料参数见表 1. 首先进行 SMA 的伪弹性测试, 模型仅划分为 3 个六面体单元, 保持温度在 325 K (对应奥氏体) 的情况下, 使 SMA 经历加卸载循环 ($p = 0.6 \text{ GPa}$). 对于几种应力点积分方法, 应力误差定义如下:

$$E^{(\sigma)} = \left\{ \sum_{i_p=1}^{n_p} \langle \sigma - \sigma_{\text{RKDP}}, \sigma - \sigma_{\text{RKDP}} \rangle \middle/ \sum_{i_p=1}^{n_p} \langle \sigma_{\text{RKDP}}, \sigma_{\text{RKDP}} \rangle \right\}^{1/2}, \quad (36)$$

这里 n_p 为 SMA 模型中所有单元积分点总数, $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 表示定义在矢量空间 \mathbb{R}^n 中的内积. 设定允许值 $R_{tol} = 1\text{E} - 9$ 和允许的最大子步数 $N_{max} = 10\ 000$ 时, Runge-Kutta-dormand-prince (RKDP) 算法获得的应力 σ_{RKDP} 被用作参考应力值, 用来评价截平面应力回映算法和自动修正 Euler 子步算法 (记为 ME (R_{tol}, N_{max})) 的精度. 表 2 给出了从 $p = 0.15 \text{ GPa}$ 到 $p = 0.8 \text{ GPa}$ 的加载过程中, 第 3 个增量步的求解数据. 可见, 随着允许值 R_{tol} 的降低, 子步更加细化, 自动修正

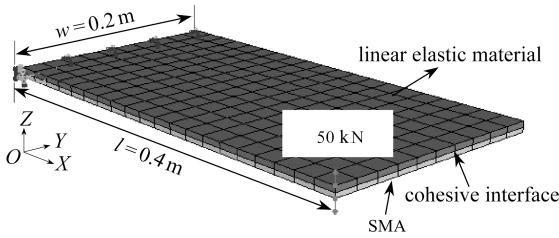
Euler 子步算法变得更加精确。比较应力误差可以发现,截平面应力回映算法所获得的整体数值精度与 ME(1E-3,10 000)的精度具有相同的阶次。与截平面应力回映算法相比,自动 ME 算法可以获得更高的积分精度。

表 2 SMA 试件的计算性能比较

Table 2 Performance comparison of different integration schemes for SMA specimen

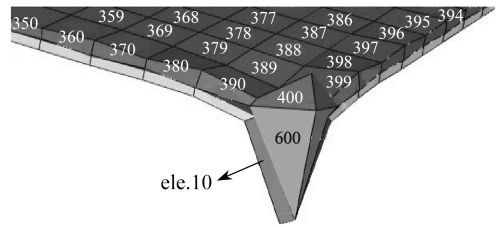
stress integration scheme	maximum successful sub-steps, n_{maxsuc}	total number of sub-steps, n_{SS}	total successful sub-steps, n_{otsuc}	successful percentage	stress error $E(\sigma)$
cutting-plane	—	—	—	—	5.21E-3
ME(1E-1,10 000)	13	111	81	73.0%	2.07E-1
ME(1E-2,10 000)	28	161	122	75.8%	1.66E-2
ME(1E-3,10 000)	58	253	207	81.8%	5.82E-3
ME(1E-4,10 000)	124	613	537	87.6%	4.05E-4
RKDP(1E-9,10 000)	1 984	20 886	20 328	97.3%	0.0E0

3.2 SMA 组合层压板的热力学响应



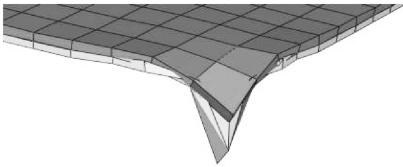
(a) 施加荷载之前

(a) Before applying tearing loads



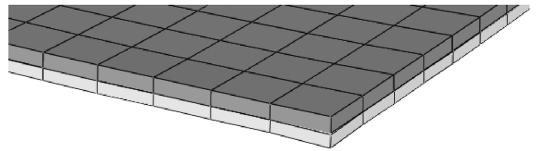
(b) 施加荷载之后

(b) After loading



(c) 荷载卸载之后

(c) After releasing loads



(d) 加热后

(d) After heating

图 1 具有 I 型分层的 SMA 成层板的有限元模拟

Fig. 1 FEM simulations of SMA laminates with mode I delamination

算例 2 如图 1 所示,线弹性材料层和 SMA 材料层之间存在 I 型分层,这里采用粘性界面单元(cohesive interface element)进行模拟。整个有限元网格包含 600 个单元,其中 200 个 SMA 单元,200 个粘性界面单元。加载过程、卸载过程和加热过程分别采用 40,10 和 10 个增量步进行模拟。图 1(b)显示了 50 kN 点荷载作用下引起的层压板分层,图 1(c)给出卸载后的结果,可以观察到 SMA 保留了较大的变形。然而如图 1(d)所示,当从 295 K 加热到 315 K 时,角部的大部分变形能够被恢复,表明 SMA 材料具有自愈的能力。基于第 10 个单元的第 1 个积分点,比较了几种应力点积分方法的计算性能,具体结果见表 3。在这个例子中,分为考虑材料几何非线性和不考虑材料几何非线性两种情况。在两种情况中,自动修正 Euler 方法在求解效率方面要优于截平面应力点回映算法。性能比较显示:相比截平面应力点回映算法,对于不考虑几何非线性的情况,自动修正 Euler 方法可以节省 25% 的求解时间;考虑几何非线性时,自动修

正 Euler 方法仍可以节省 10% 的求解时间。

表 3 基于 I 型分层的 SMA 组合板模型中第 10 个单元第 1 个积分点的不同积分方案的计算性能比较

Table 3 Performance comparison of different stress integration schemes at IP. 1 of ele. 10 for SMA plate with mode I delamination

stress integration scheme	maximum successful sub-steps, n_{maxsuc}	total number of sub-steps, n_{SS}	total successful sub-steps, n_{totsuc}	used global sub-steps, n_{globSS}	total CPU time t/s
without geometry nonlinearity					
cutting-plane	—	—	—	19	899.0
ME(1E-3, 10 000)	55	357	288	11	659.3
ME(1E-4, 10 000)	168	911	818	11	668.7
with geometry nonlinearity					
cutting-plane	—	—	—	28	864.0
ME(1E-3, 10 000)	53	339	281	24	790.2
ME(1E-4, 10 000)	162	893	792	16	710.8

4 结 论

推广了显式向前 Euler 子步算法,首次将其应用于形状记忆合金及其组合智能结构的复杂热力本构积分和数值模拟,并得出如下结论:

1) 子步算法可通过误差控制实现自动子步方案.然而与较为简洁的截平面应力回映算法相比,子步积分方案需要考虑更多因素,计算更为复杂。

2) 采用 5 阶 Runge-Kutta-dormand-prince 积分方法对截平面应力回映算法和修正 Euler 自动子步方案的计算精度进行了检验,结果表明:给定适当的允许值 R_{tol} ,相比截平面应力回映算法,修正 Euler 自动子步方案能够获得更高的积分精度。

3) 对于大规模计算,整体子步步数通常影响着整个计算时间,更加精确的数值积分往往需要更少的整体子步步数,能够显著减少计算时间,因而更适合大规模形状记忆合金及其智能结构的数值模拟。

参考文献 (References):

- [1] Brinson L C, Lammering R. Finite element analysis of the behavior of shape memory alloys and their applications[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1993, **30**(23): 3261-3280.
- [2] Burton D S, Gao X, Brinson L C. Finite element simulation of a self-healing shape memory alloy composite[J]. *Mechanics of Materials*, 2007, **38**(5/6): 525-537.
- [3] 王社良, 苏三庆, 沈亚鹏. 形状记忆合金拉索被动控制结构地震响应分析[J]. 土木工程学报, 2000, **33**(1): 56-62. (WANG She-liang, SU San-qing, SHEN Ya-peng. Seismic response analysis for passive structural control with shape memory alloy tendons[J]. *China Civil Engineering Journal*, 2000, **33**(1): 56-62. (in Chinese))
- [4] 刘爱荣, 潘亦苏, 周本宽. 形状记忆合金热力学行为的模拟[J]. 计算力学学报, 2002, **19**(1): 48-52. (LIU Ai-rong, PAN Yi-su, ZHOU Ben-kuan. Simulation to thermo-mechanical behavior of shape memory alloys[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2002, **19**(1): 48-52. (in Chinese))

- [5] 朱祎国, 吕和祥, 杨大智. 一个新的形状记忆合金的本构模型[J]. 应用数学和力学, 2002, **23**(9): 896-902. (ZHU Yi-guo, LÜ He-xiang, YANG Da-zhi. A new model of shape memory alloys[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2002, **23**(9): 896-902. (in Chinese))
- [6] 匡亚川, 欧进萍. 形状记忆合金智能混凝土梁变形特性的研究[J]. 中国铁道科学, 2008, **29**(4): 41-46. (KUANG Ya-chuan, OU Jin-ping. Research on the deformation characteristics of smart concrete beam embedded with shape memory alloy wires[J]. *China Railway Science*, 2008, **29**(4): 41-46. (in Chinese))
- [7] 陈海泉, 李忠献, 李延涛. 应用形状记忆合金的高层建筑结构智能隔震[J]. 天津大学学报(自然科学与工程技术版), 2002, **35**(6): 761-765. (CHEN Hai-quan, LI Zong-xian, LI Yan-tao. Intelligent isolation of high-rise building structures applying shape memory alloys[J]. *Journal of Tianjin University (Science and Technology)*, 2002, **35**(6): 761-765. (in Chinese))
- [8] 夏开明, 潘同燕, 刘山洪. 形状记忆合金相变过程三维大变形有限元模拟[J]. 应用数学和力学, 2010, **31**(10): 1201-1210. (XIA Kai-ming, PAN Tong-yan, LIU Shan-hong. Three dimensional large deformation analysis of phase transformation in shape memory alloys[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2010, **31**(10): 1201-1210. (in Chinese))
- [9] Tanaka K. A thermomechanical sketch of shape memory effect: one-dimensional tensile behavior[J]. *Res Mechanica*, 1986, **18**: 251-263.
- [10] Liang C, Rogers C A. One-dimensional thermomechanical constitutive relations for shape memory materials[J]. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 1990, **1**(2): 207-234.
- [11] Boyd J G, Lagoudas D C. A thermodynamic constitutive model for the shape memory materials—part I: the monolithic shape memory alloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 1996, **12**(6): 805-842.
- [12] Lagoudas D C, Bo Z, Qidwai M A. A unified thermodynamic constitutive model for SMA and finite element analysis of active metal matrix composites[J]. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 1996, **3**(2): 153-179.
- [13] 徐小明, 张盛, 姚伟岸, 钟万勰. 基于辛弹性力学解析本征函数的有限元应力磨平方法[J]. 计算力学学报, 2012, **29**(4): 511-516. (XU Xiao-ming, ZHANG Sheng, YAO Wei-an, ZHONG Wan-xie. A stress recovery method based on the analytical eigenfunctions of symplectic elasticity[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2012, **29**(4): 511-516. (in Chinese))
- [14] Qidwai M A, Lagoudas D C. Numerical implementation of a shape memory alloy thermomechanical constitutive model using return mapping algorithms[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2000, **47**(6): 1123-1168.
- [15] Chen X, Cheng Y G. On accelerated symmetric stiffness techniques for non-associated plasticity with application to soil problems[J]. *Engineering Computations*, 2011, **28**(8): 1044-1063.
- [16] Sloan S W, Abbo A J, Sheng D. Refined explicit integration of elastoplastic models with automatic error control[J]. *Engineering Computations*, 2001, **18**(1/2): 121-154.

An Explicit Sub-Stepping Stress Integration Method and Its Applications in Numerical Simulations of SMA

CHEN Xi¹, ZHANG Jian², LIU Jian-kun¹

(1. *School of Civil Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, P. R. China;*

2. *International Institute of Urban System Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, P. R. China*)

Abstract: Shape memory alloy (SMA) has complex thermomechanical constitutive relation, thus its numerical simulations demand reliable and efficient stress integration algorithms. The implicit return-mapping stress point algorithms, which have been successfully applied to such materials, may encounter convergence difficulties when loading conditions are complicated or load steps are large. Hence, an explicit sub-stepping stress integration method with automatic local error control was proposed for the simulation of the thermomechanical constitutive relation of shape memory alloys. By investigating several numerical examples, the efficiency of the proposed method and the implicit return-mapping stress point algorithm were evaluated and compared. Numerical results indicate that the number of global sub-steps dominates the entire analyzing time for large-scale computations. The proposed modified Euler automatic sub-stepping scheme leads to less global sub-steps so that the computing time is significantly reduced. Therefore, the explicit sub-stepping stress integration method has the potential for large-scale SMA simulations and computations.

Key words: shape memory alloys; smart structure; stress point integration; sub-stepping integration scheme; phase transformation