高分子材料科学与工程
POLYMER MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING

http://pmse.scu.edu.cn

# 基于深度学习与有限元耦合框架的热塑性硫化胶力学行为

张　植[1]，马丽凤[1,2]

（1. 上海工程技术大学 机械与汽车工程学院，上海 201620；2. 四川大学 高分子科学与工程学院，四川 成都 610065）

**摘要：**由于热塑性硫化胶（TPV）细观结构高度复杂、构成相多样，传统本构模型难以精确刻画其应力-应变关系，限制了其在力学建模与预测中的应用效果。为克服该问题，本研究提出了一种融合深度学习与有限元分析的建模框架。该框架通过将深度学习模型嵌入有限元高斯积分点，以应变为输入、预测应力，以数据驱动的深度学习模型近似替代显式本构关系，从而简化有限元计算过程，实现了 TPV 力学行为的高效模拟。考虑 TPV 材料在受力过程中的历史依赖性，选择 GRU 模型进行训练，并通过单轴拉伸及压缩模拟验证了所提框架的可行性。基于该框架的分析结果，分析了 TPV 在不同载荷情况下的应力-应变演变。与传统有限元方法相比，该框架可以准确且高效地捕捉 TPV 的应力。该研究为理解和预测 TPV 材料的力学性能提供了新的技术路径。

**关键词：**热塑性硫化胶；深度学习；有限元模拟；力学性能

热塑性硫化橡胶（TPV）是一种橡胶类弹性体，通常由橡胶和塑料通过熔融共混并辅以动态硫化技术而制成，它兼具硫化橡胶的良好弹性和热塑性塑料的易加工性和可回收性，被称为“绿色橡胶”[1-4]。因此，TPV 可广泛用作汽车，建筑和电子行业的结构部件或密封件[5-7]。

随着材料设计向微观结构调控方向发展，部分学者通过建立能够反映材料真实微观结构的代表体积单元（RVE）模型，并使用有限元方法（FEM）进行模拟来建立 TPV 细观结构与宏观力学性能之间的定量关系。如 Boyce 等[8]通过建立 TPV 的单胞 RVE 模型，成功预测了 TPV 在加载和卸载过程中的宏观应力-应变曲线。Li 等[9]通过蒙特卡洛算法建立了 TPV 三维随机多粒子的 RVE 模型，研究了 PP 和 EPDM 各相弹性模量的变化对 TPV 性能的影响。在有限元计算中，模型自身结构以及材料本构关系对于模拟结果的可靠性起到决定性作用的影响。然而，在 TPV 的有限元模拟中，往往存在以下不足：（1）细观结构较为复杂，难以建立与其相匹配的 RVE 模型；（2）本构关系涉及复杂的公式，并且两相之间的力学行为差距较大，将会使有限元的计算时间大大增加；（3）由于 TPV 存在大变形以及较强的非线性，将会增加有限元计算不收敛的风险。

近年来，通过深度学习(DL)捕获材料应力应变关系，推导材料的本构模型受到了广泛关注。DL 无需任何本构理论或假设，而直接从大量的数据中建立复杂的非线性关系，这不仅简化了模型的开发过程，也避免了人为假设函数可能存在的不准确性。如 Guan 等[10]采用深度学习模型来代替离散元中(DEM)的 RVE，再现砂土在不同加载路径下的复杂本构响应，在保证计算精度的同时，大大提升的计算速度。Wang 等[11]提出了一种 TCN 模型来模拟钢筋混凝土的应力应变本构模型，并提出了 TCN 模型在固体力学中的三种预期实现，包括物理信息机器学习、多尺度迁移学习框架和有限元力

doi: 10.16865/j.cnki.1000-7555.2026.0097
收稿日期：2025-06-30
通讯联系人：马丽凤，主要从事新能源/智能汽车功能材料的结构设计、算法优化、仿真分析研究，E-mail: ma.lifeng-scu@foxmail.com

方法。Qu 等[12]探索了三种不同的训练深度学习模型的方法，用于建立颗粒材料的本构模型。得出了主应变直接参与训练会大大提升深度学习模型的可靠性这一结论。

本研究以 EPDM/PP 基 TPV 为研究对象，提出了一种全新的有限元框架。该框架将 DL 模型嵌入有限元的高斯积分点中，使有限元无需通过复杂的本构关系进行计算应力，而直接通过 DL 预测得出。现有 TPV 细观力学分析通常依赖于复杂的显式本构模型，计算效率低且容易出现收敛性问题。本研究提出的 FE-GRU 框架通过深度学习代替本构模型的应力预测过程，不仅避免了复杂参数拟合，也显著提升了计算效率和收敛性。使用该框架对 TPV 进行了单轴拉伸及压缩模拟，并对比了 FE 与 FE-DL 两种模拟方法的计算时间。结果表明 FE-DL 框架不仅具有令人满意的模拟精度，其计算效率也远高于 FEM。

## 1 RVE 模型与有限元模拟

### 1.1 RVE 模型建立

为了建立能够正确反映 TPV 真实细观结构的 RVE 模型，通过 TPV 的 TEM 图像对 EPDM 的粒径进行了统计(如 Fig.1(a)所示)，如图所示不同大小的 EPDM 颗粒在 PP 基体中呈现出正态分布的趋势。基于均匀化理论[13]，可以用五种粒径不同的颗粒来代表 EPDM，其半径分别为：93.74nm、206.75nm、269.37nm、319.37nm、447.17nm，其颗粒在 PP 基体中所占的体积比如 Tab.1 所示。使用 RSA 算法建立随机多粒子且粒子具有周期性分布的 RVE 模型：设定 RVE 区域大小以及粒子半径的正态分布参数（均值与标准差），并区域内依次随机生成粒子的空间位置和半径，检测其与已有粒子（包括周期映射后的镜像粒子）是否重叠，若无重叠则将其加入模型中。该过程不断重复，直至达到设定的粒子数量或目标体积分数。由于 RVE 模型的高度真实性与复杂性，无法在 Abaqus 软件中直接对其划分六面体网格，因此采用扩散网格方法进行处理，对模型进行体素化，使其具有 185,193 个 C3D8R 六面体网格。将初始模型投影到六面体网格模型上，如 Fig.1(b)所示。

**Tab. 1 Particle sizes of EPDM in the RVE model and their volume fractions within the PP matrix**

| Grain size(nm) | Proportion in the PP matrix(%) |
|---|---|
| 93.74 | 2.67 |
| 206.75 | 6.76 |
| 296.37 | 9.69 |
| 319.37 | 15.96 |
| 447.17 | 14.61 |

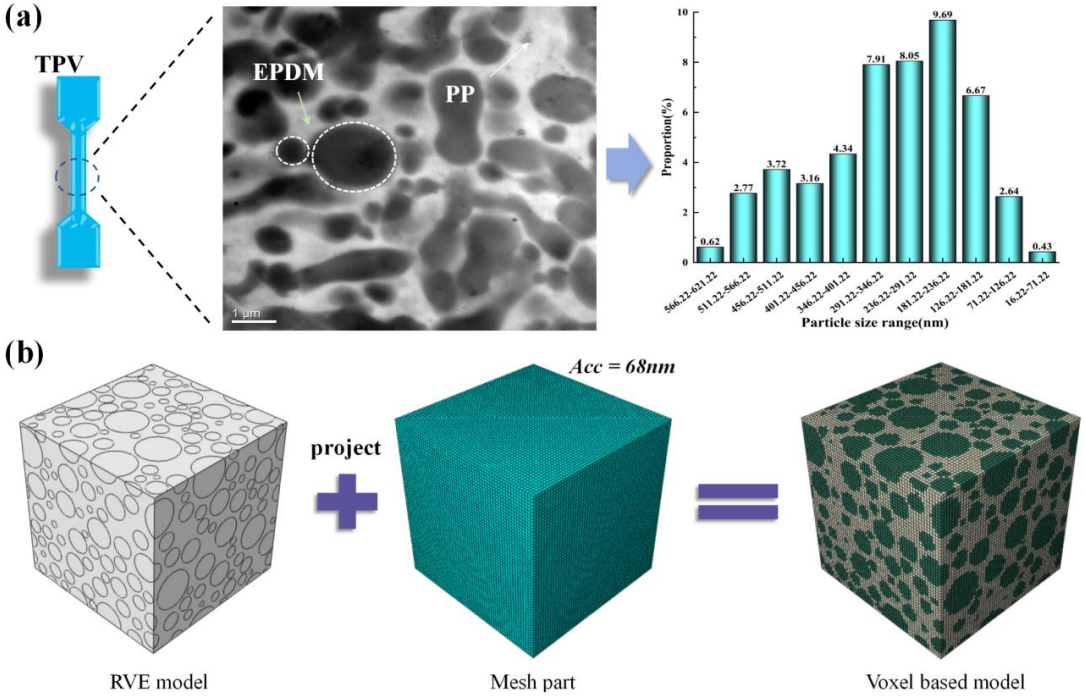



**Fig. 1 (a) TEM image of TPV and the statistical distribution of EPDM particles; (b) RVE model of TPV and its voxelization process**

## 1.2 EPDM 与 PP 本构模型

EPDM 作为一种典型的不可压缩弹性体，在受力过程中表现出明显的非线性应力-应变关系及大变形特征，因此选用基于应变能函数的超弹性本构模型对其力学行为进行描述。采用几种常用的超弹性本构模型与实验数据进行了对比，如 Fig.2 所示。其中，所有参数均由实验获得的 EPDM 应力应变数据，并通过 Abaqus 拟合获得[14]。可以观察到，Ogden-3 模型(即 3 阶 Ogden 模型)在描述 EPDM 性能时表现出了最优的精度，其表达式如下：

$$W=\sum_{i=1}^{n}\frac{\mu_i}{\alpha_i}\left(\lambda_1^{\alpha_i}+\lambda_2^{\alpha_i}+\lambda_3^{\alpha_i}-3\right) \tag{1}$$

其中，$W$ 为应变能密度函数，$\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3$ 为材料的主伸长比。$\mu_i$ 为橡胶的剪切应变相关参数，用于刻画橡胶材料的刚度，决定了应力-应变曲线的幅值。$\alpha_i$ 为 Ogden 模型中的非线性参数，用于描述材料在大变形下的非线性响应特征，决定了应力-应变曲线的形状和非线性程度。

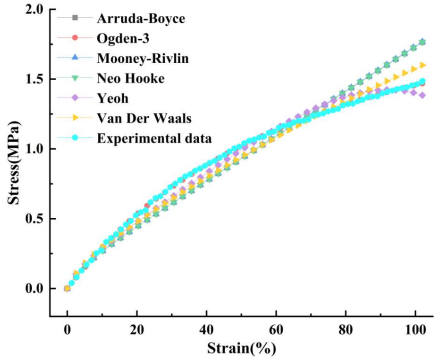



**Fig. 2 Fitting results of constitutive model**

PP 基体表现出典型的弹塑性行为，并根据塑性增量 $J_2$ 理论表征为各向同性硬化弹塑性材料[15]。EPDM 和 PP 的性能参数如 Tab.2 所示。

**Tab. 2　Mechanical properties of PP and EPDM**

| Properties of EPDM | | Properties of PP | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $\mu_i$ | $\alpha_i$ | Young's modulus (MPa) | Poisson's ratio(-) | Yield strength(MPa) | Yield strain(%) |
| - 0.0086 | 2.0132 | 243 | 0.4203 | 18.81 | 18.81 |
| 0.2434 | 3.9977 | | | | |
| 2.2174 | -2.0002 | | | | |

$\mu_i$ : correlation coefficient of shear modulus; $\alpha_i$ : nonlinear exponent

### 1.3　边界条件设置

为了确保 RVE 模型能够合理模拟无限大材料的细观结构，减少边界效应对计算结果的干扰，保持应力与应变场的连续性，并提升模拟的准确性与计算效率，需施加周期性边界条件[9]。周期性边界条件是是数值模拟中常用的一种边界条件，其核心思想是：在边界处的物理量在空间上重复，从而模拟无限大系统中的一个周期单元[16]。对于本研究中的三维情况，周期性边界条件通常使用节点自由度来描述：

$$u_{left}(y,z)=u_{right}(y,z) \tag{2}$$

$$u_{bottom}(x,z)=u_{top}(x,z) \tag{3}$$

$$u_{front}(y,z)=u_{back}(y,z) \tag{4}$$

其中，$u$ 表示不同边界的位移分量，如 $u_{left}(y,z)$ 表示左边界上的位移分布，它是一个关于 $y$ 和 $z$ 的函数，以此类推。在 Abaqus 软件中对 TPV 进行单轴拉伸测试，并将结果与实验数据进行对比，如 Fig.3 所示。通过 RVE 模型获得的应力-应变曲线显示出与实验结果基本一致的力学响应特性。这表明所开发的 RVE 模型能有效捕捉 TPV 材料的多相微观结构及其宏观力学行为，从而验证了该建模方法的有效性。

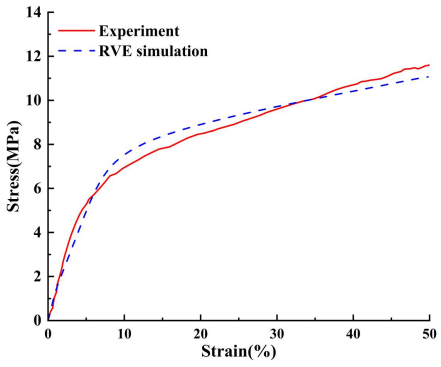



**Fig. 3　Comparison between simulation result of RVE model and experimental result of TPV**

### 1.4 有限元模拟获得应力应变数据

为了训练 DL 模型，必须获得表征 TPV 力学性能的数据集。本研究中，训练数据通过上述 RVE 模型进行单轴拉伸模拟所获得。在模拟过程中，有限元网格中个高斯点的应力应变数据可以用以下两组序列表示：

$$\left[\varepsilon_0,\varepsilon_1,\varepsilon_2,\cdots,\varepsilon_i,\cdots\right],\left[\sigma_0,\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_i,\cdots\right] \tag{5}$$

其中，$\varepsilon_i$ ,$\sigma_i$ 分别时间 $i$ 处的应变和应力张量。由于本研究所设定的周期性边界条件，应变张量与应力张量是对称的，因此在三维情况下，只需要六组应力应变分量（六个应力分量：$\sigma_{11},\sigma_{22},\sigma_{33},\sigma_{12},\sigma_{23},\sigma_{13}$，以及对应的六个应变分量：$\varepsilon_{11},\varepsilon_{22},\varepsilon_{33},\varepsilon_{12},\varepsilon_{23},\varepsilon_{13}$）就可以描述 RVE 模型每个单元的应力应变演变过程。

数据的质量会显著影响 DL 模型预测的稳定性以及准确性，尤其是数据量纲的不同将导致 DL 模型难以学习其内部规律。因此需要对数据进行归一化处理，将其大小限制在[0,1]的范围内，具体的公式为：

$$\overline{x}=\frac{x-\min\left(x\right)}{\max\left(x\right)-\min\left(x\right)} \tag{6}$$

其中，$x$ 是归一化前的数据序列，$\overline{x}$ 是归一化之后的数据序列。

## 2 深度学习与有限元耦合框架的建立

### 2.1 深度学习模型

研究表明，当材料表现出复杂的力学行为时，MLP 模型的预测精度很差[17]。这主要是因为材料的应力应变演变具有很强的历史依赖性，而 MLP 无法通过学习历史数据来对未来的数据趋势做出预测。

因此，采用时间序列模型对材料的应力应变演变进行预测是有必要的。在时间序列模型中，早期的循环神经网络（RNN）在应用于长序列的历史信息建模时会遇到梯度消失或爆炸问题，导致在循环的过程中历史信息的丢失。长短时记忆网络（LSTM）是循环神经网络的一种变体，通过引入输入门、遗忘门、输出门和细胞状态来缓解这一缺陷。但由于其网络的复杂性，在计算较大的数据集时会导致时间成本增加[18]。门控循环单元（GRU）在 LSTM 模型的基础上仅使用“重置门”和“更新门”对数据进行处理，并将隐藏状态和细胞状态合并成了一个状态，这使得网络更加简洁，训练速度大大提升[19]。因此，本研究选择 GRU 模型。

本研究中，由于 TPV 的应力应变演变具有典型的历史依赖性，即这一时刻的应力不仅受到该时刻应变的影响，同时也受上一时刻应力的影响。因此，选择当前时刻应变与上一时刻的应力应变作为输入，并将当前时刻的应力作为输出，建立时间序列模型。其数学表达如下：

$$\sigma_i=f_{DL}\left(\varepsilon_{i-1},\sigma_{i-1},\varepsilon_i\right) \tag{7}$$

其中，$i-1$ 和 $i$ 分别表示两个时刻的数据。

训练过程旨在最大限度地减少预测输出与真实值之间的差异，这是由损失函数量化的。在本研究中，常用的均方误差(MSE)被选为损失函数，表示为：

$$MSE=\frac{1}{n}\sum_{m=1}^{n}\left(\hat{y}_m-y_m\right) \tag{8}$$

其中，$n$表示输出值的数量，$\hat{y}_m$和$y_m$分别表示预测值和真实值

## 2.2 深度学习耦合有限元

有限单元法是一种数值分析方法，在针对材料细观结构方面有着广泛的应用。其核心思想是将复杂的问题区域划分为许多小的、简单的子区域（即有限单元），在每个单元中用较简单的函数来近似表示解，然后通过整体组装和求解得到整个问题的近似解[20,21]。用有限元法求解非线性的准静态问题一般步骤为：

(1) 由动量守恒获得控制方程：

$$\nabla\cdot\sigma+b=0\text{, in }\ \Omega_t \tag{9}$$

$$u=\bar{u}\ \text{ on }\ \Gamma_u \tag{10}$$

$$\sigma\cdot n=\bar{t}\ \text{ on }\ \Gamma_t \tag{11}$$

其中，$\sigma$为 Cauchy 应力张量，$b$为单位体积外力，$\Omega_t$为当前时刻的物体体积。

(2) 将能量转换为应力形式：

$$\sigma=\frac{1}{J}FSF^T,\ \ J=\det\left(F\right) \tag{12}$$

$$F=\frac{\partial x}{\partial X} \tag{13}$$

$$S=\frac{1}{2}\left(F^TF-I\right) \tag{14}$$

其中，$S$为二阶 Piola-Kirchhoff 应力，$F$为变形梯度。

(3) 利用虚功原理将几何域$\Omega$离散到合适的网格中：

$$\int_{\Omega_t}\delta d:\sigma d\Omega=\int_{\Omega_t}\delta u\cdot bd\Omega+\int_{\Gamma_t}\delta u\cdot td\Gamma \tag{15}$$

应变张量ε从位移梯度的对称部分获得：

$$\varepsilon=\frac{1}{2}\left(\nabla u+\nabla u^T\right) \tag{16}$$

将位移矩阵用形函数近似，并代入虚功表达式得到单元残差力向量：

$$R\left(u\right)=f_{\text{int}}\left(u\right)-f_{ext}=0 \tag{17}$$

其中，$u$为形函数，$f_{\text{int}}$为内部力，$f_{ext}$为外部力。

在非线性情况下，整体刚度矩阵$K$取决于状态参数和加载历史，采用 Newton-Raphson 迭代求解方法，用切线矩阵$K_T$代替整体刚度矩阵，表示如下：

$$K_T=\frac{\partial R}{\partial u}=\int_{\Omega_0^e}\left[B\right]^TC_{mat}\left[B\right]d\Omega+K_{geo} \tag{18}$$

其中，$C_{mat}$是材料切线模量（四阶张量），$K_{geo}$为几何刚度项。

FE-DL 框架的整体思路如 Fig.4 所示。FEM 为 DL 模型提供上一时刻的应力应变数据和当前时

刻的应变数据，作为 DL 模型的输入，并输出得到当前时刻的应力。输出所得到的应力用于计算内部力(等式 16)，从而计算出单元残差向量(等式 17)。完整的实现流程如下：

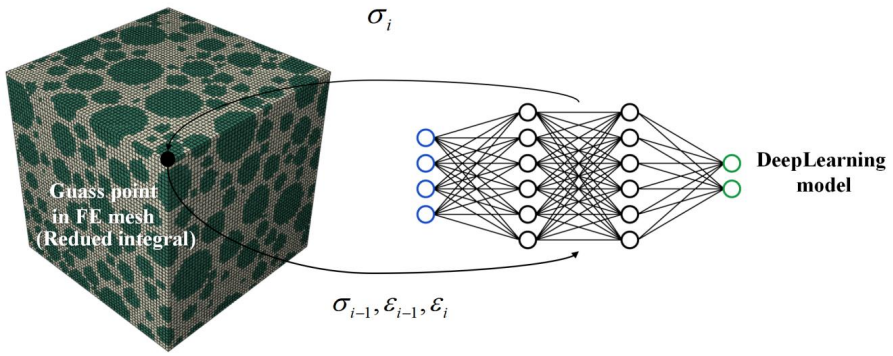



**Fig. 4　Schematic illustration of the FE- DL framework**

**(1)** 建立 TPV 的 RVE 模型，并利用体素化划分网格，定义边界条件以及本构关系，施加应变载荷，在 Abaqus 软件中进行有限元模拟。

**(2)** 通过 Python 脚本对 odb 文件进行应力应变数据的提取，并对数据结构进行处理，以适应深度学习模型所需要的数据结构。

**(3)** 训练深度学习模型。

**(4)** 将训练好的模型，通过 Python 脚本嵌入 Abaqus 软件，形成 FE-DL 框架。并再次施加不同的应变载荷，更新 ODB 文件，以验证该框架的准确性。

## 3　FE-GRU 模型细观力学建模

### 3.1　细观力学建模：单轴拉伸

在 Abaqus 中对 TPV 进行单轴拉伸模拟，分别将应变设置为 50%和 60%，并提取所有高斯积分点的应力应变数据（由于采用了减缩积分，每个单元仅有一个高斯点）。将 50%应变的数据作为训练集，对 DL 模型进行训练，60%应变的数据作为验证集，验证其对应力预测的准确程度。该 RVE 模型共有 185 193 个高斯积分点，每个高斯积分点均存在一条应力-应变曲线被用于训练 GRU 模型。其中，GRU 模型的超参数由 Tab.3 并将其嵌入有限元的高斯积分点中。

**Tab. 3　Hyperparameter of GRU model**

| Hyperparameter | Value |
|---|---|
| Batch size | 512 |
| Feature size | 2 |
| Hidden size | 16 |
| Learning rate | 0.0001 |

Fig.5(a)比较了 FE 模拟与 FE-DL 框架模拟的 Mises 应力云图，为了更加清晰的展示 3D 云图的内部结构，分别对两者的云图在相同位置进行了截面剖分处理。Fig.5(b)将使用该框架获得的轴向应力与传统有限元进行对比，可以观察到 FE-GRU 框架与 FE 结果十分接近。通过计算，得出 FE-GRU 模型的预测结果与 FEM 的计算结果最大误差为 1.18%，平均误差仅为 0.68%，证明了该框架预测

TPV 应力演变的准确性。值得注意的是，FE-GRU 框架在应力预测方面表现出良好的精度与稳定性。其模拟结果不仅成功再现了材料细观尺度上的应力演化趋势，更在 PP/EPDM 界面区域捕捉到了梯度式应力过渡区域。这种连续且非突变的界面响应特征在传统有限元方法中往往难以捕捉，而基于深度学习的 FE-GRU 模型能够通过应力-应变历史的学习能力对材料内在复杂非线性行为进行高保真度建模，从而提升了数值模拟对真实物理行为的还原能力。

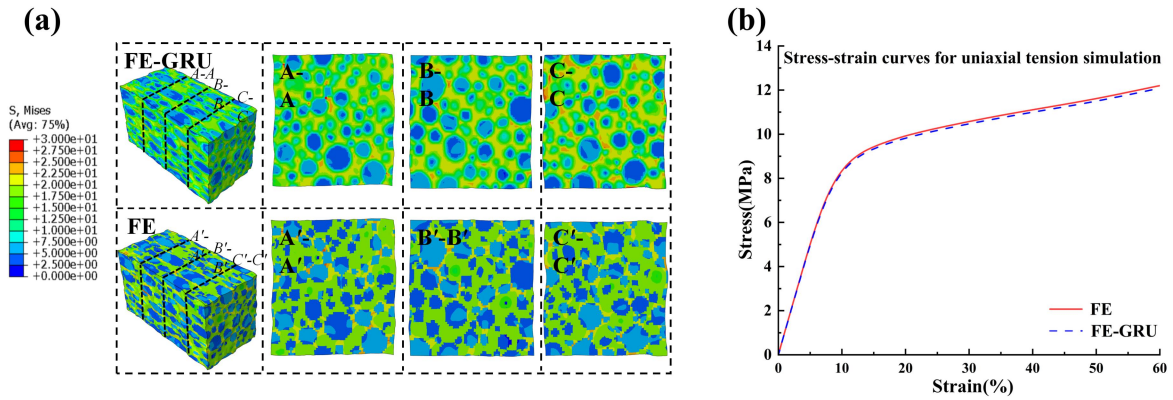



**Fig. 5　Uniaxial tension: (a) comparison of Mises stress contours; (b) stress-strain curves between FE and FE-GRU**

在模型 Z 轴的 1/2 处，ε值为 1.5%、30%和 60%时提取平面，从而得到 Fig.6 中展示了 TPV 材料在单轴拉伸条件下不同应变的 Mises 应力分布演化。由图可见，TPV 材料的细观相结构对整体应力响应具有显著影响，体现出相间力学性能差异所引发的应力分布不均匀性。在初始加载阶段（ε = 1.5%），整体应力水平较低，应力主要集中在 PP 基体中 EPDM 颗粒的赤道区域，表明应力在相界面附近首先产生响应。尽管载荷较小，PP 与 EPDM 之间已呈现出明显的力学非均质性，这表明两相间初始界面存在一定的刚度梯度与载荷传递差异。当应变增大至 30%时，TPV 的微观结构发生显著重排，应力沿拉伸方向逐步扩展，EPDM 颗粒周围的应力集中区域逐渐增多并扩展至颗粒间区域。此阶段，PP 基体作为主承载相，内部出现大量椭圆状和环状高应力区，反映出颗粒间薄韧带结构在多点协同作用下的载荷转移特征，同时也暗示了 EPDM 颗粒对 PP 相产生的扰动效应正在增强。至 60%应变时，应力集中现象显著加剧，尤其在 PP 基体中连接相邻 EPDM 颗粒的桥联区域及颗粒赤道带出现连续高应力分布，表明此类结构区域可能成为局部损伤萌生的潜在起始点。与此同时，EPDM 颗粒整体保持低应力状态（在云图中表现为蓝色），反映出其高度可变形性以及对主承载路径的削弱作用。整体来看，材料的力学响应表现出明显的应力分区行为：PP 主导承担应力，EPDM 主要承担形变。

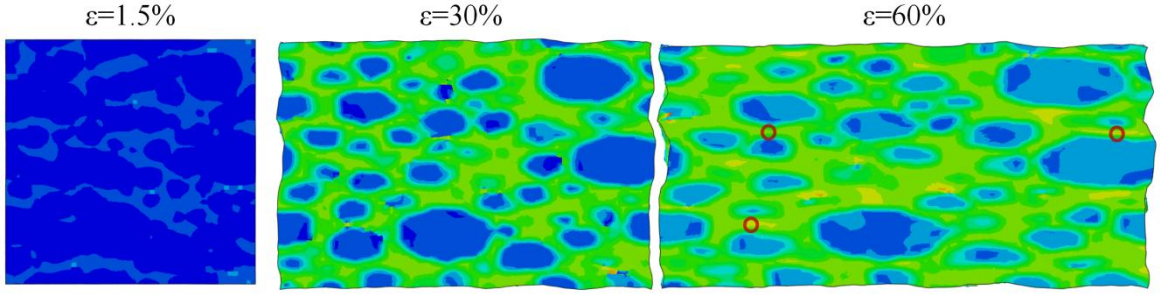



**Fig. 6　Uniaxial tension: stress contours of TPV model with *XY* section**

提取了赤道区(**Fig.6** 中圆圈标记区域)节点的应力-应变曲线，如 **Fig.7** 所示。可以观察到，所有曲线均呈现出典型的非线性特征。在初始加载阶段，应力随应变迅速上升，表现出较高的应力增长速率，反映了材料在微小变形下的弹性响应。该阶段应力集中主要由 PP 基体对 EPDM 颗粒赤道区的限制所致，颗粒在加载方向上遭受强约束，迅速形成应力集中区。这与 Mises 应力云图中的初始赤道带高应力区相一致。随应变进一步增加，曲线趋于平缓，进入明显的“应力平台区”。此阶段应力增长速率显著降低，表明 EPDM 颗粒在赤道区域通过大变形方式有效耗散外加载荷能量。微观上，该行为可归因于 EPDM 的高柔顺性与非线性粘弹特性，其结构可通过变形调节外部载荷，使局部应力保持相对稳定。在高应变区域，曲线再次出现缓慢上升趋势。此现象说明颗粒的变形已达到一定极限，内部聚合物链被进一步拉伸取向，导致材料刚度提升，应力重新增长。此阶段伴随颗粒与基体之间的界面黏结增强、剪切区约束加强等微观机制，是 EPDM 颗粒逐步“失去柔性”的表现。

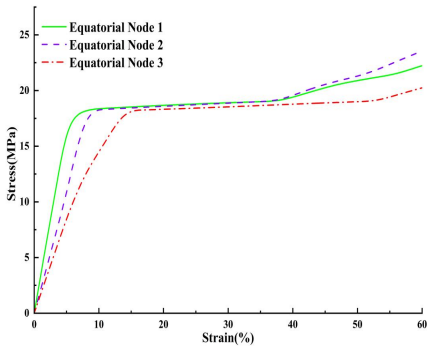



**Fig. 7　Uniaxial tension: Mises stress of equatorial yield region**

### 3.2　细观力学建模：单轴压缩

为了验证 FE-GRU 框架对于不同载荷的适用性，对 TPV 进行了单轴压缩模拟，其结果 Mises 云图和轴向应力应变曲线如 Fig.8(a)和(b)所示。两种模拟方式的结果非常相似，经计算 FE-GRU 模型预测的最大误差为 1.27%，平均误差仅为 0.71%，可以很好的描述 TPV 的力学行为。云图显示应力从接触面最大值 40.0 MPa 向边缘递减至 5.0 MPa，呈明显梯度分布，表明压缩载荷下 TPV 存在显著的应力集中效应。高应力区（红色）可能对应 EPDM 聚集区域或界面结合处，而低应力区（蓝色）反映 PP 相的局部屈服。

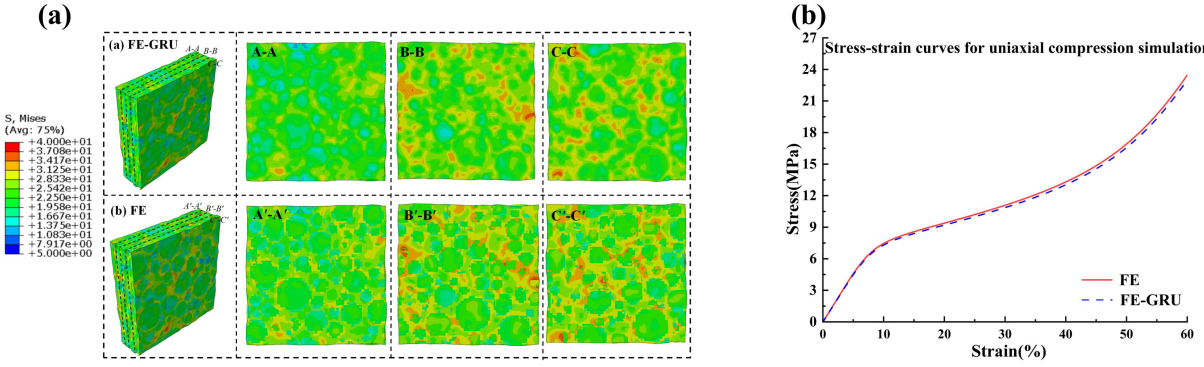



**Fig. 8　Uniaxial compression: (a) comparison of Mises stress contours; (b) stress-strain curves between experiment and FE-GRU**

在模型 Z 轴的 1/2 处，ε值为 1.5%、30%和 60%时提取平面，从而得到 Fig.9 中展示了 TPV 材料在单轴压缩条件下不同应变的 Mises 应力分布演化。随着应变从 1.5%逐步增加至 60%，材料内部应力分布由初始的均匀低应力状态逐渐过渡为显著的非均匀高应力区域，反映出从线性弹性阶段向非线性大变形阶段的转变。在低应变阶段（ε = 1.5%），材料处于弹性响应区间，应力主要均匀分布于 PP 基体相中，EPDM 尚未产生明显形变。而在中等应变（ε = 30%）时，由于基体刚度较大，优先承担载荷，EPDM 发生较大形变，界面处的相对滑移和应力集中开始显现。至高应变阶段（ε = 60%），应力集中进一步增强，局部区域可能出现屈服或损伤迹象，橡胶粒子间的相互作用增强，微结构重排明显，材料整体呈现出协同变形与能量耗散行为。

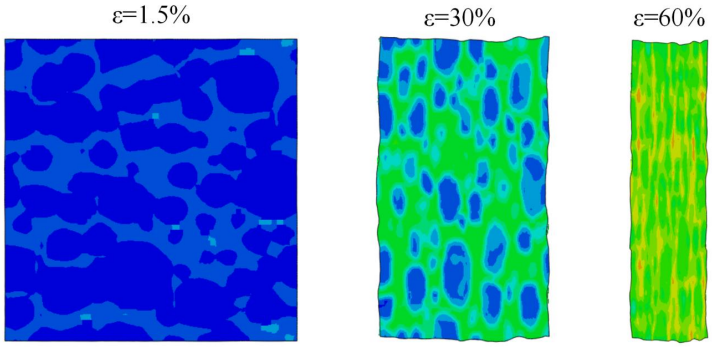



**Fig. 9　Uniaxial compression: stress contours of TPV model with *XY* section**

该演化机制反映出 TPV 在加载过程中的非均质相互作用特性，其由橡胶粒子在塑性基体中分散形成的结构决定了其复杂的载荷传递路径和应力重分布特性。橡胶相的高可变形性和基体相的高刚度共同决定了材料在不同应变阶段下的力学响应，从而表现出优异的缓冲性能和大变形能力。

## 4　计算时间

需要强调的是，计算时间受到使用设备的影响。本研究的所有计算均使用英特尔 i9 CPU 以及英伟达 Geforce RTXA 4000 GPU 进行。单轴拉伸与压缩实验的计算耗时如 Fig.10(a)所示。其中，FE-GRU 的计算时间包含了 GRU 模型的训练时间，尽管如此，其计算时间仍然只有 FE 模型的 50%。并且，由于 TPV 大变形的材料特性，FE 计算中需要求解复杂的非线性方程，采用逐步迭代的方法来求解。在每个时间步长，随着应变的增大，求解器需要更多的计算步骤来达到收敛。这导致即使是很小的应变增长，如从 60%应变增加为 70%，所需要的计算时间都是呈倍数增长的。

本研究使用 FE-GRU 模型进行了 70%、80%应变下单轴拉伸的模拟，并对比了与 FE 模拟所使用时间，如 Fig.10(b)所示。FE-GRU 框架中，由于应力直接通过 GRU 模型预测获得，无需进行复杂计算。可以观察到，随着应变的不断增长，FE-GRU 框架的算时间并没有显著的提升。

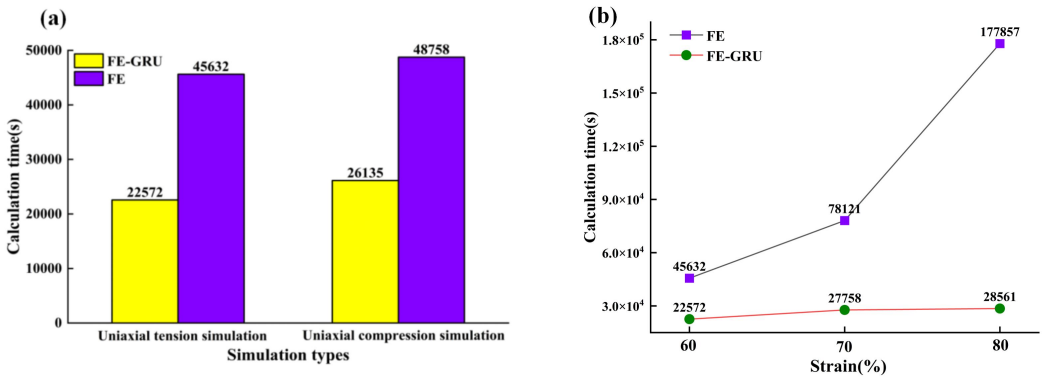



**Fig. 10　Calculation time of different (a) simulation methods and (b) strain**

## 5　结论

本研究提出了一种新的有限元框架，该框架通过结合 Pytorch 和 Abaqus 实现 TPV 力学行为的分析，有效改善了传统有限元计算时间长、收敛性差的不足。为了考虑聚合物材料的历史依赖性，在 FE-DL 框架中，DL 模型接收上一时刻的应力应变，和当前时刻的应变数据，并输出当前时刻的应力数据用于推进有限元的计算。无需任何本构模型，高斯积分点处的应力数据直接通过 DL 模型预测获得，因此避免了材料刚度矩阵的复杂推导。通过对 RVE 模型的单轴拉伸及压缩模拟，验证了 FE-DL 框架的可行性，并分析了 TPV 在应变增长过程中的应力演变。该方法不仅在理论上为 TPV 细观结构与宏观力学性能的关联研究提供了新思路，同时也可为实际工程应用提供价值。例如，该方法能够快速预测 TPV 在不同载荷条件下的力学性能，可为密封件、减震部件等 TPV 制品的性能优化与结构设计提供参考。此外，由于该方法显著提升了计算效率，为进一步研究 TPV 的回弹机理，提高材料的性能铺平了道路。

**参考文献：**

[1] Li C, Ma L, Zhu Z. Deformation mechanism of thermoplastic vulcanizate (TPV) from a view of micromechanical scale[J]. Polymer, 2024, 309: 127442.

[2] Ma L, Liu C, Dou R, et al. Significantly improved high dielectric MWCNTs filled PVDF/PS/HDPE composites via constructing double bi-continuous structure[J]. Composites Part B: Engineering, 2021, 224: 109158.

[3] Xu X, Ma L, Guo H, et al. A predictive model for the relationship between processing conditions and properties of thermoplastic vulcanizates (TPVs) via machine learning[J]. Composites Science and Technology, 2023, 240: 110095.

[4] Zhang Z, Ma L, Li L, et al. Machine learning-driven constructing relationship between processing and mechanical properties of TPV: A view of one stacking model[J]. Polymer, 2025, 326: 128359.

[5] Ma L, Li C, Liu C. Construct the relationship of the interface structure-properties for TPV via micromechanical method based on cohesive zone model[J]. Polymer, 2023, 286: 126348.

[6] Ma L, Yang W, Jiang C. Stretchable conductors of multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) filled thermoplastic vulcanizate (TPV) composites with enhanced electromagnetic interference shielding performance[J]. Composites Science and Technology, 2020, 195: 108195.

[7] Ma L, Hu J, Dou R. Multiwalled carbon nanotubes filled thermoplastic vulcanizate dielectric elastomer with excellent

resilience properties via inhibiting MWCNT network formation[J]. Journal of Applied Polymer Science, 2021, 138(13): 50129.

[8] Boyce M C, Yeh O, Socrate S, et al. Micromechanics of cyclic softening in thermoplastic vulcanizates[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2001, 49: 1343-1360.

[9] Li C, Ma L, Zhu Z, et al. Microstructure-Driven mechanical behavior and recovery mechanism of thermoplastic vulcanizates: A multi-scale analysis[J]. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 2025, 192: 108776.

[10] Guan Q, Yang Z, Guo N, et al. Deep learning-accelerated multiscale approach for granular material modeling[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2024, 48(5): 1372-1389.

[11] Wang J, Zuo Y, Yue X, et al. Prediction of high-temperature mechanical properties of filled rubber based on the deep learning algorithm[J]. Polymer Composites, 2025, 46: 5453-5462.

[12] Qu T, Di S, Feng Y T, et al. Towards data-driven constitutive modelling for granular materials via micromechanics-informed deep learning[J]. International Journal of Plasticity, 2021, 144: 103046.

[13] Xing Y, Gao Y. Multiscale eigenelement method for periodical composites: a review[J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2019, 32: 104-113.

[14] He C, Ma L, Xie X, et al. Micromechanical insights for enhancing the rebound resilience of sealing materials based on TPV[J]. Polymer, 2024, 312: 127679.

[15] Jahani Y, Ghetmiri M, Vaseghi M R. The effects of long chain branching of polypropylene and chain extension of poly(ethylene terephthalate) on the thermal behavior, rheology and morphology of their blends[J]. RSC Advances, 2015, 5: 21620-21628.

[16] Bonora N, Ruggiero A. Micromechanical modeling of composites with mechanical interface-Part II: damage mechanics assessment[J]. Composites Science and Technology, 2006, 66: 323-332.

[17] Zhang P, Yin Z Y, Jin Y F. State-of-the-art review of machine learning applications in constitutive modeling of soils[J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2021, 28: 3661-3686.

[18] Yu Y, Si X, Hu C, et al. A review of recurrent neural networks: LSTM cells and network architectures[J]. Neural Computation, 2019, 31: 1235-1270.

[19] Weerakody P B, Wong K W, Wang G, et al. A review of irregular time series data handling with gated recurrent neural networks[J]. Neurocomputing, 2021, 441: 161-178.

[20] Jiang C, Zhang Z, Han X, et al. Selective smoothed finite element methods for extremely large deformation of anisotropic incompressible bio-tissues[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2014, 99: 587-610.

[21] Zhang Z Q, Liu G R. Solution bound and nearly exact solution to nonlinear solid mechanics problems based on the smoothed FEM concept[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2014, 42: 99-114.

# Mechanical Properties of Thermoplastic Vulcanizates Based on a Deep Learning-Finite Element Coupled Framework

Zhi Zhang[1], Lifeng Ma[1,2]

(1. School of Mechanical and Automotive Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China; 2. College of Polymer Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

**ABSTRACT:** Thermoplastic vulcanizates (TPV) possess highly complex microstructures and heterogeneous phase compositions, making it difficult for traditional constitutive models to accurately capture their stress–strain relationships. This limitation significantly hinders the effectiveness of conventional mechanical modeling and predictive analysis. To overcome this challenge, the present study proposed a novel modeling framework that has integrated deep learning with finite element analysis. Within this framework, deep learning models was embedded into the Gaussian integration points of the finite element mesh to predict stress directly from strain, effectively replacing complex constitutive equations and enabling the efficient simulation of TPV mechanical behavior. Recognizing the history-dependent nature of TPV under loading, GRU model was employed for training purposes. The feasibility of the proposed framework was validated through simulations of uniaxial tension and compression. Based on the simulation results, the stress–strain evolution of TPV under various loading conditions was analyzed. Compared with conventional finite element methods, the proposed approach can accurately and efficiently capture the stress responses of TPV. This research provides a novel method for understanding and predicting the mechanical properties of TPV materials.

**Keywords:** thermoplastic vulcanizate; deep learning model; finite element method; mechanical properties