

Periodická homogenizace strukturálních metamateriálů.

Ing. Gleb Pokatilov <gleb.pokatilov@tul.cz>, Ing. Martin Špetlík <martin.spetlik@tul.cz>, vedoucí práce: doc. Ing. Petr Henyš, Ph.D.

V článku je stručně popsána homogenizace a periodická homogenizace strukturálních metamateriálů. K simulacím byly použity numerické řešiče FeniCS, NGSolve, NetGen. Periodická homogenizace byla uplatněna při výpočtu efektivních hodnot elastických koeficientů různých patternů metamateriálu. V článku jsou popsány parametrické metody generování nových odvozených patternů strukturálních metamateriálu.

Klíčová slova: Strukturální metamateriál, periodická homogenizace, NGSolve.

Úvod

Metamateriály představují v současnosti jeden z klíčových směrů ve vývoji programovatelných materiálu a struktur, které mají inženýrsky navrhnuté vlastnosti. Současný návrh metamateriálů se ponejvíce omezuje na známé návrhové geometrické vzory, často vedoucí k auxetickému chování [1]. Metamateriály vhodné pro kombinované fyzikální zatížení (např. tepelné a mechanické) se vyskytují v literatuře spíše zřídka, a to na bázi běžných vzorů [1].

Ačkoliv je návrhový prostor metamateriálů velmi široký, neexistuje v současnosti univerzální postup, který by umožnil návrh racionalizovat a systematizovat [2]. Úkolem této práce je připravit vhodné metody k použití strojového učení k optimalizaci geometrie metamateriálů.

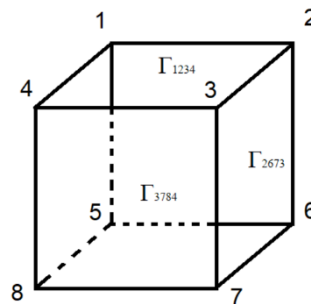
Metodika

Strukturální metamateriál se skládá z buněk předem definované geometrie (patternů) - reprezentativních objemových prvků. Tyto patterny se v materiálu periodicky opakují. Řešení výpočetní úlohy elasticity s mikrostrukturální geometrií patternů je velmi výpočetně náročné. K zjednodušení tohoto problému je použita homogenizace pro lineární pružnost s periodickými okrajovými podmínkami [3,4]. Formulovali jsme úlohu lineární elasticity pro příslušné OKP (Rovnice 1).

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \bar{\sigma} &= 0 & \text{on } \Omega, \\ \bar{\sigma} \cdot n &= 0 & \text{on } \Gamma. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{\Gamma_{1234}} - u_{\Gamma_{5678}} &= \hat{\varepsilon}(x_{\Gamma_{1234}} - x_{\Gamma_{5678}}) & \text{on } \Gamma_{1234} \cup \Gamma_{5678}, \\ u_{\Gamma_{2637}} - u_{\Gamma_{1584}} &= \hat{\varepsilon}(x_{\Gamma_{2637}} - x_{\Gamma_{1584}}) & \text{on } \Gamma_{2637} \cup \Gamma_{1584}, \\ u_{\Gamma_{3784}} - u_{\Gamma_{2651}} &= \hat{\varepsilon}(x_{\Gamma_{3784}} - x_{\Gamma_{2651}}) & \text{on } \Gamma_{3784} \cup \Gamma_{2651}. \end{aligned}$$

Rovnice 1



Obrázek 1: Prostor Ω s okrajovými oblastmi

Makroskopický tenzor deformace a tenzor mechanického napětí jsou značeny $\hat{\varepsilon}$, $\hat{\sigma}$. Dále je předpokládán tenzor malých deformací. Vztah mezi makroskopickými veličinami tenzoru deformací a tenzorem napětí je vyjádřen pomocí průměrování:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sigma \, d\Omega, \\ \hat{\varepsilon} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \varepsilon \, d\Omega. \end{aligned}$$

Dále je nutné zablokovat translaci, toho bylo dosaženo pomocí podmínky nulového posunu u .

$$\int_{\Omega} u \, d\Omega = 0$$

Slabou formulaci problému lze vyjádřit pomocí Lagrangeových multiplikátorů.

$$\int_{\Omega} \varepsilon(u) : \sigma(v) \, d\Omega + \int_{\Gamma_+} \lambda \cdot \llbracket v \rrbracket \, d\Gamma + \int_{\Gamma_+} w \cdot \llbracket u \rrbracket \, d\Gamma = \int_{\Gamma_+} w \cdot g^0 \, d\Gamma.$$

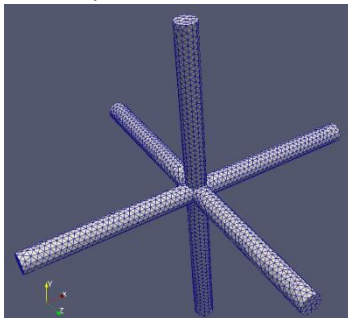
nebo pomocí penalty

$$\int_{\Omega} \varepsilon(u) : \sigma(v) \, d\Omega + \alpha \int_{\Omega} u \cdot v \, d\Omega = \int_{\Gamma_+} w \cdot g^0 \, d\Gamma.$$

Pro správnou aplikaci je třeba počítat s geometrií, shodnou v oblastech periodických okrajových podmínek. Síťovací algoritmus byl podmíněn k vytvoření sítě s periodickými okraji.

Explicitní geometrii patternů lze řídit různými parametry, například změnou délek jednotlivých stran geometrie buňky, nebo změnou průměru vláken. My jsme se rozhodli řídit geometrii pomocí

translační a rotační deformace a to numericky, řešením úlohy metodou konečných prvků nebo analyticky, zobrazením jednotlivých uzlů sítě dle vhodných rovnic do nových souřadnic. V případě numerické deformace se jedná o zatěžování patternu jako pevného kontinua ve 3 translačních a 3 rotačních směrech a řešení příslušné soustavy diferenciálních rovnic. V případě analytické deformace byla nalezena vhodná transformační rovnice pro rotaci a translaci tak, že se pozice uzlů v okrajových oblastech nemění a nenastává překryv elementů sítě. K výpočtům byla použita následující základní geometrie patternu (Obrázek 2):



Obrázek 2 Základní pattern

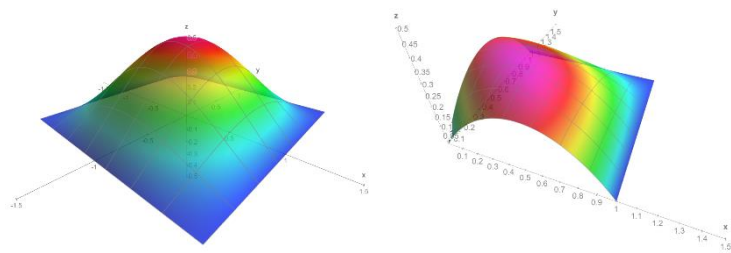
K transformaci translací byla následně použita rovnice zobrazující v příslušném směru (x,y,z):

$$f_z(x, y, z) = T_z \cdot \frac{(K^2 - x^2)(K^2 - y^2)(K^2 - z^2)}{2K^4} \left(\exp\left[\frac{-x^2}{1+K}\right] + \exp\left[\frac{-y^2}{1+K}\right] \right)$$

K transformaci rotací byla použita rovnice zobrazující dle příslušné osy rotace (x,y,z):

$$f_{\varphi_z}(x, y) = \frac{(K - |x|)(K - |y|)(x + y)}{K^3}$$

$$Rot_Z = \begin{bmatrix} x - [x \cdot \cos(R_Z \cdot f_{\varphi_z}) - y \cdot \sin(R_Z \cdot f_{\varphi_z})] \\ y - [y \cdot \sin(R_Z \cdot f_{\varphi_z}) + x \cdot \cos(R_Z \cdot f_{\varphi_z})] \\ z \end{bmatrix}$$

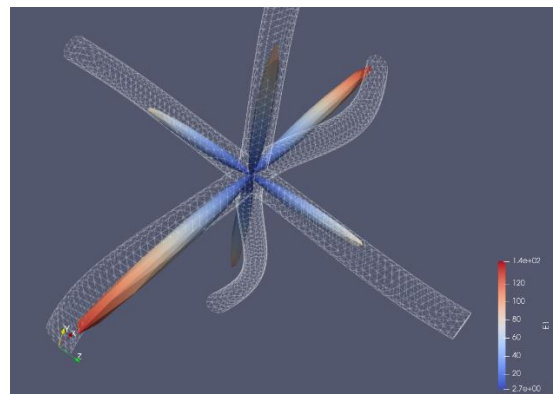


Obrázek 3 Vizualizace transformačních funkcí.
Vpravo translace Z (pro K=1, z=0), vlevo pro rotaci Z.

Výsledky a diskuze

Pomocí analytické deformace popsané v předchozí kapitole jsme schopni pomocí 6-ti parametrů řídit geometrii patternů. Nová geometrie byla dále zatěžována pomocí periodických okrajových podmínek a pomocí homogenizace byly vypočteny efektivní hodnoty elastických konstant. Pro jejich kvantifikování v závislosti na orientaci

zatížení jsme použili sférické zobrazení (Obrázek 4 Sférické zobrazení E₁).



Obrázek 4 Sférické zobrazení E₁

Analytická deformace základního patternu představuje výpočetně nenáročnou parametrickou metodu řízení geometrie. Pomocí této metody je možné také efektivně porušit nebo měnit symetrii.

Závěr

Byly vytvořeny vhodné metody ke kvantifikování elastických konstant navržených metamateriálů a efektivní metoda k řízení jejich geometrie. Tyto předpoklady jsou klíčové pro další optimalizaci metamateriálů pomocí strojového učení.

Poděkování

Tato práce byla podpořena z projektu Studentské grantové soutěže (SGS) na Technické univerzitě v Liberci v roce 2023.

Reference

- [1] Ji, J. C., Quantian Luo, and Kan Ye. "Vibration control based metamaterials and origami structures: A state-of-the-art review." Mechanical Systems and Signal Processing 161 (2021): 107945.
- [2] Pahlavani, Helda, et al. "Deep learning for the rare-event rational design of 3D printed multi-material mechanical metamaterials." Communications Materials 3.1 (2022): 1-11.
- [3] Henyš, P., Čapek, L., Březina, J., 2019. Comparison of current methods for implementing periodic boundary conditions in multi-scale homogenisation. European Journal of Mechanics-A/Solids 78, 103825.
- [4] Petr Henyš, Gleb Pokatilov, 2023 The edge smoothed finite element for multiscale homogenization, Engineering Analysis with Boundary Elements, ISSN 0955-7997