

Streszczenie

„Modelowanie właściwości mechanicznych wybranych zaawansowanych materiałów za pomocą wieloskalowych elementów skończonych”

Rozdział 1: Wprowadzenie

W ostatnich latach można zaobserwować znaczący postęp w dziedzinie nowych materiałów i technologii ich wytwarzania. Najlepszym tego przykładem są kompozyty, metamateriały, i elementy wytwarzane w technologii druku 3D. Ich nowe właściwości są uzyskiwane poprzez łączenie kilku materiałów bazowych (kompozyty) lub poprzez układanie materiału w przestrzeni tak, aby uzyskać specyficzną mikrostrukturę (metamateriały, druk 3D). Naukowcy znajdują zastosowanie tych materiałów w kluczowych gałęziach nauki i przemysłu, takich jak astronautyka, medycyna, przemysł samochodowy, czy budownictwo. Zasadniczą częścią procesu projektowania nowego materiału są kosztowne i czasochłonne eksperymenty laboratoryjne. Wspomagane są one również obliczeniami numerycznymi, które pozwalają znacząco skrócić czas i koszt projektowania.

Wieloskalowa struktura zaawansowanych materiałów wymaga uwzględnienia skali mikro w symulacjach komputerowych. Zadanie to, opisywane przez równania różniczkowe z oscylującym współczynnikiem, jest trudne do bezpośredniego rozwiązania za pomocą standardowych metod numerycznych takich jak np. metoda elementów skończonych (MES) ze względu na rozmiar problemu (liczbę stopni swobody) i czas obliczeń. Dlatego rozwijane są wieloskalowe metody numeryczne, które poprzez stworzenie relacji pomiędzy skalą makro i mikro, pozwalają na przeprowadzanie obliczeń w skali makro jednocześnie uwzględniając w obliczeniach skalę mikrostruktury materiału. Jedną z takich metod jest wieloskalowa metoda elementów skończonych (MsFEM).

W niniejszej pracy podjęto próbę zastosowania MsFEM w modelowaniu numerycznym mechaniki zaawansowanych materiałów. Zaproponowano oryginalne modyfikacje metody oraz przeprowadzono szereg numerycznych testów sprawdzających dokładność i skuteczność metody. Ponadto zaproponowano adaptację MsFEM do modelowania elementów wytwarzanych w technologii druku 3D. Numerycznym testom towarzyszyły nowatorskie pomiary eksperymentalne na próbkach wykonanych za pomocą druku 3D przeprowadzone w celu walidacji metody.

Rozdział 2: Przegląd literatury

W literaturze można znaleźć wiele metod, które dedykowane są problemom wieloskalowym i rozwiązują podjęte zadanie w różny sposób m.in. metoda homogenizacji asymptotycznej [45] lub metoda wykorzystująca reprezentatywny element objętości (RVE) [35], czy dwupoziomowa metoda elementów skończonych (FE²) [20].

Metoda MsFEM zaproponowana przez Hou i Wu [25] zakłada utworzenie rzadkiej siatki makroelementów, z reguły nie uwzględniającej mikrostruktury. Ideą metody jest obliczanie funkcji bazowych siatki rzadkiej rozwiązując zagadnienie brzegowe z tym samym równaniem różniczkowym co oryginalny problem. W praktyce obliczane są funkcje kształtu w każdym makroelemencie używając siatki gęstej, która jest dopasowana do mikrostruktury. Następnie przeprowadzane są globalne obliczenia jak w klasycznej metodzie elementów skończonych na siatce rzadkiej. Umożliwia to znaczne zmniejszenie liczby stopni swobody przy jednoczesnym uwzględnieniu informacji o złożonej mikrostrukturze, która jest wbudowana w funkcje bazowe. Zaletą metody jest fakt, iż obliczenia dla poszczególnych makroelementów odbywają się w sposób całkowicie niezależny. Umożliwia to zrównoleglenie algorytmu, co dodatkowo skraca czas obliczeń.

Obliczania wieloskalowe wiążą się z wprowadzeniem dodatkowych błędów numerycznych. Autorzy oryginalnej metody zauważyli, że jakość otrzymanego rozwiązania zależy w dużej mierze od warunków brzegowych w zagadnieniu obliczania funkcji kształtu (efekt rezonansu). Aby zniwelować ten efekt zaproponowana została technika „oversampling” [25, 28], w której problem funkcji kształtu jest rozwiązywany w większym obszarze niż jeden makroelement, a z jego wyników generowane są oscylujące funkcje kształtu na brzegu danego makroelementu. Stosowano również okresowe warunki brzegowe, podobne jak w metodzie RVE [56].

Innym podejściem poprawiającym rozwiązanie metody MsFEM jest zwiększanie liczby stopni swobody analogiczne do zwiększania stopnia aproksymacji w MES. Nowe funkcje kształtu wyższego rzędu w MsFEM zostały wprowadzone na bazie wielomianów Lagrange’a [19] oraz funkcji hierarchicznych [36, 6]. To podejście zostało wykorzystane w algorytmie adaptacji [43, 31] oraz w zadaniu optymalizacji topologii [37].

Zastosowanie siatki rzadkiej i siatki gęstej umożliwia w łatwy sposób wykorzystanie iteracyjnego podejścia korekcji rozwiązania. Ponadto, zaadaptowano w MsFEM podejście z metody multigrid [24] oraz lokalną korekcję w nośnikach funkcji bazowych [42]. Dla tego ostatniego przykładu metoda zbiega się do rozwiązania z siatki gęstej.

Oryginalnie MsFEM został opracowany w celu skutecznego rozwiązywania problemów przepływu w niejednorodnych ośrodkach porowatych wykorzystywanych w symulacjach złóż ropy naftowej i gazu ziemnego [49]. Metoda została później zaadaptowana do problemów sprężystości kompozytów i metamateriałów w [56]. Przy użyciu MsFEM modelowano m. in. problem zginania belek i płyt [57], lepkosprężysty beton asfaltowy [31, 33], czy kompozyty piezoelektryczne [18].

Rozdział 3: Pełne teksty artykułów stanowiących rozprawę doktorską

W tym rozdziale pracy zamieszczono pełne teksty artykułów stanowiących rozprawę doktorską. Poniżej znajduje się lista z danymi bibliograficznymi artykułów wraz z punktacją zgodną z wykazem czasopism naukowych Ministerstwa Edukacji i Nauki oraz współczynnik wpływu czasopism (Impact Factor, IF):

Artykuł 1 M. Dryzek i W. Cecot. A coupling of multiscale finite element method and isogeometric analysis. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 18(4):439–454, 2020. 40 punktów, IF = 1.591.

Artykuł 2 M. Dryzek i W. Cecot. The iterative multiscale finite element method for sandwich beams and plates. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 122:6714–6735, 2021. 200 punktów, IF = 3.477.

Artykuł 3 M. Dryzek i E. Dryzek. Positron annihilation lifetime spectroscopy of ABS objects manufactured by fused deposition modelling. *Acta Physica Polonica A*, 132(5):1506-1508, 2017. 40 punktów, IF = 0.577.

Artykuł 4 M. Dryzek, W. Cecot, i M. Tekieli. Experimental and multiscale computational static and dynamic study of 3D printed elements with mesostructure. *Finite Elements in Analysis and Design*, 215:103876, 2023. 100 punktów, IF = 2.618.

W następnych podrozdziałach zamieszczono streszczenie każdego z nich.

Artykuł 1: Połączenie metody MsFEM z analizą izogeometryczną

W artykule zaproponowane zostało budowanie wieloskalowych funkcji bazowych MsFEM wykorzystując krzywe B-sklejane wyższego rzędu rozpięte na kilku makroelementach. Główną cechą tego podejścia jest obliczanie funkcji bazowej w jednym kroku w całym jej nośniku, w przeciwieństwie do standardowych funkcji kształtu stosowanych w MsFEM, które są obliczane element po elemencie siatki zgrubnej i sklejane w czasie agregacji.

Przeprowadzono wybrane eksperymenty numeryczne na przykładzie zagadnienia przepływu w ośrodkach porowatych z periodycznym i losowym rozkładem właściwości materiału, aby przetestować zmodyfikowaną metodę MsFEM z nowymi funkcjami bazowymi. Uzyskano lepsze wyniki od standardowej metody nawet z techniką oversampling. Zaobserwowano jednak efekt rezonansu, gdy stosunek wielkości wtrąceń do rozmiaru siatki zgrubnej dążył do jednego. Pokazano, że jest możliwa redukcja tego efektu poprzez zwiększenie rzędu krzywych B-sklejanych.

Artykuł 2: Iteracyjna metoda MsFEM dla belek i płyt warstwowych

W artykule zaadaptowano metodę MsFEM do analizy belek i płyt warstwowych ze złożoną strukturą kompozytową. Zaproponowana modyfikacja znacząco zmniejsza liczbę stopni swobody modelu obliczeniowego (nawet o cztery rzędy) dzięki anizotropowej aproksymacji wyższego rzędu oraz nowym funkcjom kształtu uwzględniającym niektóre warunki brzegowe. Co więcej, w algorytmie wykorzystano iteracyjny schemat korekcyjny [42] odpowiednio zmodyfikowany do problemów zginania. Dzięki temu możliwe jest odtworzenie rozwiązania z siatki rzadkiej. Przedstawiono kilka przykładów obliczeniowych, aby zademonstrować możliwości metody. Stwierdzono, że zaproponowane modyfikacje funkcji kształtu i aproksymacja wyższego rzędu zwiększają zbieżności algorytmu iteracyjnego. Na koniec poddano walidacji model wieloskalowy, porównując wyniki numeryczne z wynikami eksperymentalnymi uzyskanymi w próbie zginania warstwowej płyty falistej o dużej gęstości. Zaobserwowano bardzo dobrą zgodność obu wyników dla pojedynczej iteracji algorytmu.

Artykuł 3: Spektroskopia czasu życia pozytonów w obiektach z ABS wytworzonych w procesie osadzania topionego materiału

W artykule przeprowadzono badania z wykorzystaniem spektroskopii czasu życia pozytonów (PALS) na próbkach z polimeru akrylonitrylo-butadieno-styrenowego (ABS) wytworzonych w procesie osadzania topionego materiału w celu zbadania możliwości identyfikacji różnic w mikrostrukturze. Przygotowano zestaw próbek składający się z płytek kwadratowych i długich prostokątnych (o długości 100 mm i 200 mm) wytwarzanych tak, że ustawienie wszystkich włókien materiału jest równoległe do dłuższej krawędzi. Stosowano różne odległości między włóknami, co skutkuje różnym nakładaniem się osadzanego materiału w kierunku poziomym i pionowym. Nieznaczny wzrost czasu życia orto-pozytonium, wskazujący na wzrost średniego promienia wolnej objętości, zaobserwowano dla najdłuższych próbek, dla których spodziewany jest największy wpływ nakładania się włókien w kierunku poziomym. Nie zaobserwowano różnic dla parametru odległości między włóknami. Badania przeprowadzono w Instytucie Fizyki Jądrowej PAN w Krakowie, w pracowni anihilacji pozytonów.

Artykuł 4: Eksperymentalne i wieloskalowe numeryczne badania elementów drukowanych 3D z mezostrukturą w warunkach obciążenia statycznego i dynamicznego

W artykule przedstawiono wyniki przeprowadzonych badań eksperymentalnych elementów ze złożoną mezostrukturą drukowaną metodą osadzania topionego materiału. Wyniki eksperymentalne posłużyły do walidacji modelu numerycznego metody MsFEM z aproksymacją wyższego rzędu. Zaproponowano trójskalowe podejście w modelu numerycznym: w mikroskali ścieżki włókien filamentu są homogenizowane przy użyciu ortotropowego modelu materiału o eksperymentalnie zidentyfikowanych właściwościach; w mezoskali wydrukowana struktura jest wbudowana do funkcji kształtu MsFEM; w makroskali całe zadanie jest ostatecznie rozwiązywane. Aby zweryfikować podejście przeprowadzono eksperymentalne pomiary statycznego zginania oraz drgań swobodnych belek o czterech różnych mezostrukturach i dwóch orientacjach drukowania. Pomiary wykonano z wykorzystaniem optycznego systemu pomiaru deformacji pola odkształcenia. Wyniki eksperymentalne zostały bardzo dobrze odtworzone przez model numeryczny w wielu przykładach. Ponadto badanie ujawniło, że hierarchiczne funkcje kształtu wyższego rzędu mogą dokładnie reprezentować drgania swobodne nawet dla wysokich częstotliwości.

Rozdział 4: Walidacja eksperymentalna

W tym rozdziale zamieszczono zdjęcia próbek i elementów badanych w czwartym artykule oraz wyniki badań numerycznych metamateriału z ujemnym współczynnikiem Poissona zaprojektowanym na podstawie badań eksperymentalnych z [34].

Ujemny współczynnik Poissona materiału oznacza, że materiał poddany rozciąganiu będzie również rozszerzał się w kierunku poprzecznym. Takie zachowanie materiału jest spowodowane obecnością periodycznej mezostruktury, której elementy skręcają się i zginają podczas rozciągania próbki. Materiał z mezostrukturą nazywany jest metamateriałem. Zaproponowano eksperyment numeryczny, w którym wyznaczano współczynnik Poissona wybranego metamateriału przy pomocy wyników uzyskanych metodą MsFEM dla różnego stopnia aproksymacji oraz z wykorzystaniem techniki oversampling. Wykazano zmniejszenie się błędu rozwiązania mierzonego w normie L_2 oraz w normie

energetycznej względem rozwiązania referencyjnego wraz ze wzrostem stopnia aproksymacji. Zaobserwowano również zwiększenie błędu przy zmniejszaniu rozmiaru siatki rzadkiej, co wskazuje na silny efekt rezonansu. Rozwiązanie uzyskane techniką oversampling jest najbardziej zbliżone do rozwiązania referencyjnego. Dla najmniejszego rozmiaru makroelementów współczynnik Poissona uzyskany z liniowymi funkcjami był dodatni i wyniósł 0.0028. Przy zwiększaniu stopnia aproksymacji uzyskano współczynnik równy -0.11. Korzystając z techniki oversampling uzyskano współczynnik -0.28. Wynik referencyjny to -0.35, a wynik z eksperymentu to -0.28.

Rozdział 5: Podsumowanie

Niniejsza rozprawa obejmuje temat modyfikacji i testowania wieloskalowej metody elementów skończonych w kontekście zaawansowanych materiałów. W pracy przedstawiono przegląd literatury dotyczącej metody, autorskie modyfikacje, testy numeryczne oraz eksperymentalną walidację metody.

Przeprowadzono liczne testy i walidację metody MsFEM z hierarchicznymi funkcjami bazowymi. Wykazano, że błąd rozwiązania wieloskalowego można zmniejszyć, zwiększając liczbę stopni swobody nawet w skrajnym przykładzie materiału o ujemnym współczynniku Poissona. Wykorzystano funkcje wyższego rzędu w problemach belek i płyt. Łącząc to podejście z iteracyjnym schematem korekcji, udało się zwiększyć szybkość zbieżności metody. Zaproponowano ponadto nowy sposób budowania wieloskalowych funkcji bazowych i zwiększania liczby stopni swobody wykorzystując krzywe B-sklejane. Wykazano, że to podejście dla pewnych rozmiarów makroelementów daje wyniki lepsze od standardowej metody MsFEM z techniką oversampling. Jednak w tym podejściu zauważono silny efekt rezonansy. Udało się go zmniejszyć, zwiększając rząd krzywych B-sklejanych.

Metoda MsFEM została poddana walidacji poprzez porównanie z wynikami z eksperymentów na próbkach wytwarzanych w technologii druku 3D. Rozwiązania numeryczne z modeli wieloskalowych z funkcjami wyższego rzędu dobrze korelowały z wynikami eksperymentalnymi statycznego zginania. Błędy rozwiązania znajdowały się w przedziale 2-5%. W testach dynamicznych zmierzone częstotliwości drgań własnych badanych próbek zostały przewidziane przez model MsFEM z błędem 5%.

Do oryginalnych aspektów pracy należą:

1. Zastosowanie krzywych B-sklejanych w algorytmie MsFEM obejmujące implementację idei i testy numeryczne dla problemu przepływu w stanie ustalonym w ośrodkach niejednorodnych.
2. Adaptacja MsFEM do analizy belek i płyt warstwowych z wykorzystaniem hierarchicznych funkcji wyższego rzędu i iteracyjnego schematu korekcyjnego. Implementacja i testy numeryczne na przykładach struktur 2D i 3D oraz walidacja z danymi eksperymentalnymi.
3. Nowatorskie testowanie elementów z ABS wytworzonych w technologii druku 3D przy użyciu optycznego systemu pomiaru deformacji pola odkształcenia, akcelerometru, i spektroskopii czasu życia pozytonów.
4. Zastosowanie MsFEM do analizy mechanicznej elementów wytwarzanych w technologii druku 3D i walidacja poprzez porównanie wyników z modelu numerycznego z eksperymentami.

5. Testowanie MsFEM na przykładzie problemu metamateriału o ujemnym współczynniku Poissona w celu identyfikacji jego właściwości.

Istnieje szereg dyscyplin naukowych i inżynierskich, w których zaawansowane materiały znajdują zastosowanie. Autor uważa, że dalsze badania nad modelowaniem wieloskalowym materiałów kompozytowych i metamateriałów oraz rozwój metod wieloskalowych takich jak metoda MsFEM, przyspieszy postęp w tych dyscyplinach. Dalsze badania nad rozwojem metody MsFEM mogą obejmować implementację i testowanie innych modeli konstytutywnych. Innym aspektem przyszłych badań mogą być wspomniane przez wielu autorów artykułów trudności związane z przygotowaniem modelu MsFEM np. trudność z siatkowaniem w skali gęstej, zwłaszcza blisko granicy makroelementów, co może prowadzić do nieregularności siatki i pogorszenia właściwości przestrzeni aproksymującej. Potencjalnym rozwiązaniem może być rozdzielenie siatki gęstej i siatki rzadkiej korzystając z metod niedostosowanych elementów skończonych (unfitted finite element method). W tych metodach problem jest rozwiązywany przy pomocy standardowej metody elementów skończonych, ale powierzchnie międzyfazowe lub granice geometrii siatki rzadkiej są zintegrowane w sformułowaniu wariacyjnym, a siatka gęsta nie musi być dopasowana do tej geometrii. Może to ułatwić proces przygotowywania wieloskalowych modeli i korzystanie z MsFEM w komercyjnie dostępnym oprogramowaniu.

Abstract

In recent years, we can observe a significant development of new materials and the technological advancements that these new materials have allowed. The most relevant examples would be these of composites, metamaterials, and 3D printing. The growing demand for numerical modeling that include multiscale nature of materials is the main motivation for the research presented in this dissertation. One example of a numerical method capable of resolving problems with many scales is the Multiscale Finite Element Method (MsFEM) that is the main topic of this thesis.

The thesis presents investigation on the MsFEM capabilities of modeling the mechanical behavior of advanced materials. During the course of the research, original modifications to the method were proposed and numerically tested to confirm its accuracy and efficiency. This includes: an introduction of the higher-order B-splines as a new way of building the MsFEM basis functions; modeling sandwich beams and plates with complex lattice layers using the anisotropic higher-order coarse-scale approximation and the novel shape functions that take into account the microscale boundary conditions incorporated into the method in the iterative corrector scheme; and an adaptation of MsFEM for modeling the mechanical behavior of 3D printed elements using a three-scale approach. Moreover, numerical tests were accompanied by novel experimental measurements of 3D printed material samples and parts to validate the method in an engineering scenario.

The applicability of MsFEM was demonstrated on linear problems of steady-state flow in heterogeneous media, elasticity, and free vibrations of objects made of heterogeneous, anisotropic material with mesostructure with voids. Number of degrees of freedom was reduced even by four orders of magnitude compared to standard finite element models without introducing a significant additional approximation error as demonstrated in a few examples. Moreover, a new way of building multiscale basis functions using B-splines was shown that it outperforms original MsFEM. The additional error can be reduced by increasing the order of the B-spline used. When using the method with the iterative corrector scheme, it was shown that proposed approach with higher-order functions gives a new possibility of reaching desired accuracy faster with a large reduction of the necessary number of degrees of freedom. In case of modeling 3D printed elements, the multiscale solutions correlate well with experimental tests for both static and dynamic, yielding a 2-5% difference of the experiment and higher-order MsFEM results.

Keywords: *multiscale finite element method, higher-order shape functions, composite structures, extrusion 3D printing testing*