

УДК 539.3

Численная гомогенизация неоднородных структур на основе цифровых прототипов

Акифьев Кирилл Николаевич	kirillakifyev@mail.ru SPIN-код: 8428-7137
Бережной Дмитрий Валерьевич	berezhnoi.dmitri@mail.ru SPIN-код: 8186-4972
Смирнова Виктория Владимировна	yaikovavictoriya@mail.ru SPIN-код: 8101-3211
Семенова Елена Вячеславовна	elena.semionova2011@gmail.com SPIN-код: 6453-9450
Герасимов Олег Владимирович ^(*)	valeriy.karasikov@gmail.com SPIN-код: 6942-2009

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Аннотация. Рассмотрен улучшенный метод численной гомогенизации неоднородных материалов на основе данных компьютерной томографии. Представлен подход, использующий конечно-элементный ансамбль для усреднения механических свойств в представительном элементе объема. Показано, что метод позволяет учитывать локальную неоднородность структуры и ортотропию материала при снижении вычислительной сложности. Проведена валидация метода на аддитивно изготовленных образцах с эллипсоидальной полостью и моделях костной ткани карликовых свиней. Сделаны выводы о высокой точности и эффективности метода по сравнению с существующими аналогами, что позволяет применять его для моделирования материалов сложной структуры.

Ключевые слова: численная гомогенизация, неоднородные материалы, метод конечных элементов, цифровой прототип, компьютерная томография, механические свойства

Numerical homogenization of inhomogeneous structures based on digital prototypes

Akifyev Kirill Nilolaevich	kirillakifyev@mail.ru SPIN-code: 8428-7137
Berezhnoi Dmitri Valerjevich	berezhnoi.dmitri@mail.ru SPIN-code: 8186-4972
Smirnova Viktoriya Vladimirovna	yaikovavictoriya@mail.ru SPIN-code: 8101-3211
Semenova Elena Vyacheslavovna	elena.semionova2011@gmail.com SPIN-code: 6453-9450
Gerasimov Oleg Vladimirovich ^(*)	valeriy.karasikov@gmail.com SPIN-code: 6942-2009

Kazan (Volga region) Federal University, Kazan, Russia

Abstract. An improved method for numerical homogenization of porous materials based on CT-data is presented. The approach utilizes a finite element ensemble to average mechani-

cal properties within a representative volume element. It is shown that the method accounts for local structural inhomogeneity and material orthotropy while reducing computational complexity. Validation was performed on additively manufactured samples with an ellipsoidal cavity and bone tissue models of minipigs. Conclusions are drawn about the high accuracy and efficiency of the method compared to existing analogues, making it suitable for modeling materials with complex structures.

Keywords: numerical homogenization, inhomogeneous materials, finite element method, digital prototype, computed tomography, mechanical properties

Введение. Актуальной задачей современного материаловедения и биомеханики является определение эффективных механических свойств неоднородных материалов, уникальная структура которых обуславливает сложное поведение под нагрузкой. Особую сложность представляет моделирование композиционных материалов или биологических тканей, характеризующихся выраженной анизотропной (иерархической) структурой [1]. Традиционные методы определения механических характеристик, основанные на натурных экспериментах, зачастую оказываются трудоемкими и не всегда позволяют учесть индивидуальные структурные особенности конкретного образца.

Широкое внедрение методов неразрушающего контроля, в частности рентгеновской компьютерной томографии (КТ), открыло возможности для создания цифровых прототипов, точно воспроизводящих внутреннюю структуру материалов. Однако прямое численное моделирование таких детализированных моделей методом конечных элементов (КЭ) сопряжено с высокой вычислительной стоимостью из-за огромной размерности получаемых систем уравнений [2]. Эффективным подходом к снижению вычислительной нагрузки является применение методов численной гомогенизации, позволяющих определить усредненные свойства материала в представительном элементе объема [3]. Существующие методы гомогенизации требуют проведения серии вычислительных экспериментов и могут быть чувствительны к граничным условиям [4]. Другой подход, предполагающий аппроксимацию всей области одним КЭ с усредненными свойствами, не позволяет адекватно учесть структурную анизотропию и симметрию неоднородности [5].

Таким образом, существует потребность в разработке эффективных и точных методов численной гомогенизации, сочетающих высокую детализацию учета неоднородной структуры и приемлемую вычислительную сложность. В работе предлагается улучшенный метод, основанный на использовании КЭ-ансамбля для гомогенизации данных цифровых прототипов, позволяющий повысить точность определения эффективных свойств за счет увеличения степеней свободы модели при сохранении вычислительной эффективности. Целью работы является валидация предложенного метода на примере модельных образцов костной ткани и аддитивно изготовленных объектов с заданной структурой неоднородности.

Материалы и методы. В основе исследования лежит метод численной гомогенизации, позволяющий определить эффективные механические свойства неоднородного материала в элементе объема на основе данных цифро-

го прототипа, полученного путем сегментации изображений КТ. Метод представляет собой модификацию подхода для V-периодических материалов [3] и предполагает использование КЭ-ансамбля вместо аппроксимации области одним КЭ [5], что позволяет точнее учитывать структурную анизотропию.

Гомогенизированный тензор упругости 4-го ранга C^H рассчитывался по формуле [5]:

$$C_{ijkl}^H = \frac{1}{|V|} \int \Delta \varepsilon_{pq}^{(ij)} C_{pqrs} \Delta \varepsilon_{rs}^{(kl)} dV, \quad (1)$$

где C_{pqrs} — компоненты локального тензора упругости; $\Delta \varepsilon_{pq}^{(ij)}$ и $\Delta \varepsilon_{rs}^{(kl)}$ — компоненты тензора отклонения деформаций для (ij)-го и (kl)-го нагружения соответственно.

При дискретизации области и переходе к матричной форме записи для КЭ-ансамбля выражение (1) преобразуется к виду [5]:

$$[D^H] = \frac{1}{|V|} \sum [\Delta \chi_k^\omega]^T [K_k^\omega] [\Delta \chi_k^\omega], \quad (2)$$

где $[K_k^\omega]$ — матрица жесткости k-го КЭ, построенная с учетом взвешенного интегрирования по данным КТ-вокселей, принадлежащих его объему; $[\Delta \chi_k^\omega]$ — матрица локальных отклонений узловых перемещений; N^E — количество элементов в ансамбле.

Первой экспериментальной группе принадлежали образцы, изготовленные из полилактида (PLA) методом послойного наплавления (FDM) в виде кубов с эллипсоидальной полостью в центре, ориентированной под углами 0° , 45° и 90° (рис. 1). Испытания на сжатие проводились на разрывной машине УТС-110М с одновременной КТ-томографией [6].

Вторая группа состояла из модельных образцов костной ткани, извлеченных из КТ-снимков костных органов карликовых свиней [5]. Выборка включала образцы с различной морфологией: высокой и низкой пористостью и различной кривизной поверхности (рис. 2).

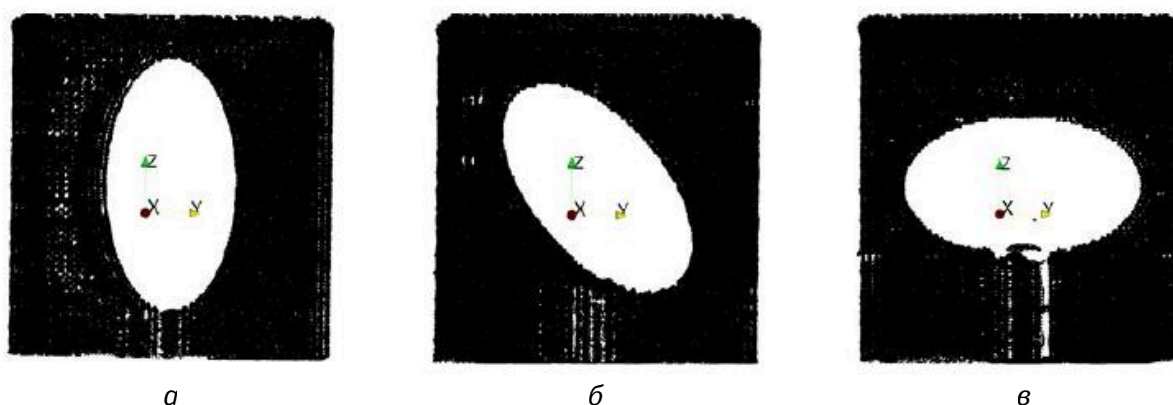


Рис. 1. Образцы с эллипсоидальной неоднородностью:
а — 0° ; б — 45° ; в — 90°

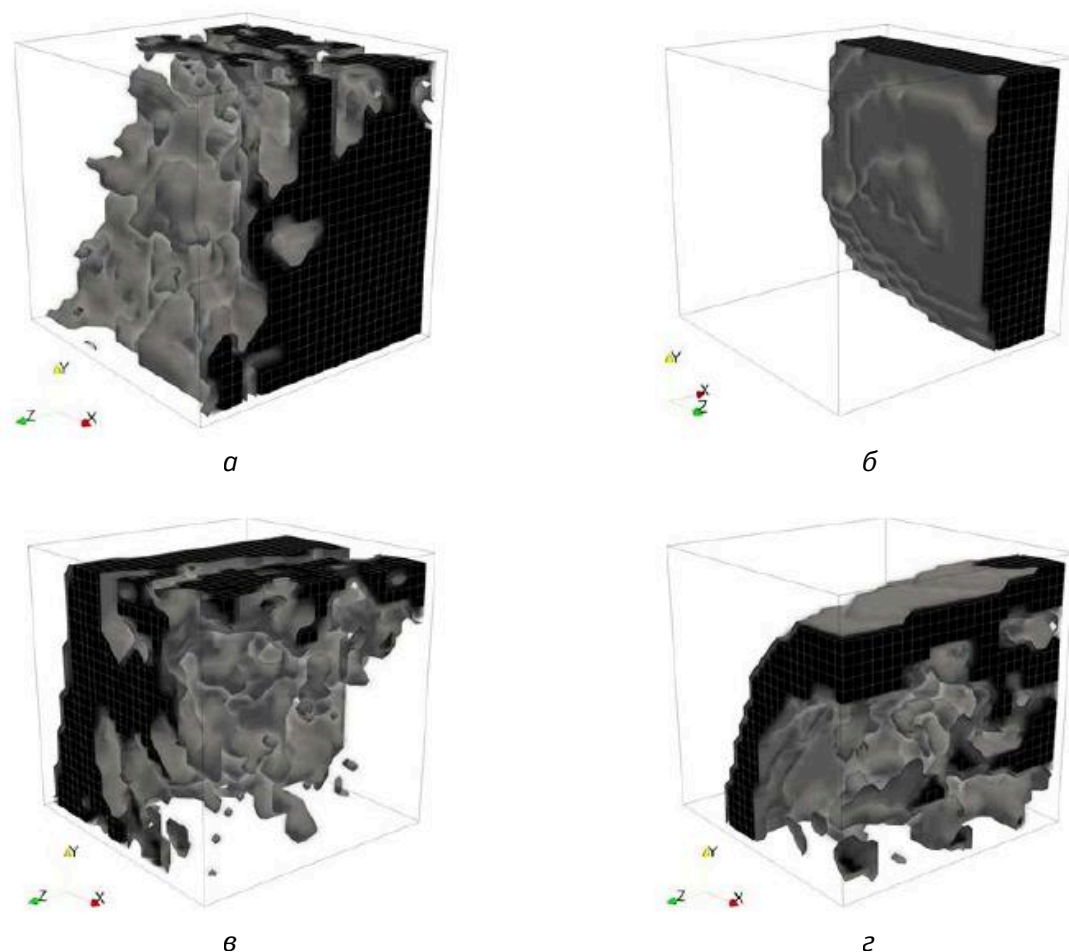


Рис. 2. Сегментированные изображения модельных образцов костной ткани:
а, б — высокая и низкая пористость материала; в, г — низкая и высокая кривизна поверхности

Сегментация КТ-изображений выполнялась методом Оцу с бинаризацией на две фазы: твердая ткань и воздух. Для построения расчетных сеток использовались восьмиузловые гексагональные изопараметрические КЭ. Алгоритм был реализован на языке C++ с использованием библиотек Eigen и OpenMP.

Результаты. Для образцов с эллипсоидальной полостью отклонение расчетных значений модуля упругости от экспериментальных данных в направлении приложения нагрузки не превышало 0,42 %. Улучшенный метод показал отклонение от экспериментальных данных в 2,93 %, что существенно ниже, чем у аналогичного подхода определения реакции на эквивалентную силу [4], при этом время расчетов сократилось более чем в 6 раз. Анализ сечной сходимости показал, что использование КЭ-ансамбля из 15^3 элементов является оптимальным. Дальнейшее увеличение плотности сетки не приводило к значительному изменению результатов (коэффициент вариации значений модуля упругости $\leq 0,2$ %), но вызывало экспоненциальный рост времени вычислений.

Усовершенствованный метод позволил получить более достоверные значения эффективных модулей упругости элементов костной ткани с разной

морфологией (рис. 2) по сравнению с аппроксимацией одним КЭ [5]. Наибольшие различия (до 76 % для модуля E_{xx}) наблюдались в направлениях с максимальной пористостью, где аппроксимирующий метод завышал жесткость материала. Для образцов с наличием сечений, полностью принадлежащих пустому пространству (рис. 2 б, г), метод корректно определил значения модулей упругости близкими к нулю в соответствующих направлениях, что свидетельствует о его высокой чувствительности к пространственному распределению материала.

Обсуждение. Результаты исследования показывают, что улучшенный метод численной гомогенизации на основе КЭ-ансамбля позволяет с высокой точностью определять эффективные механические свойства неоднородных материалов. Преимуществом представленного метода является его способность учитывать структурную анизотропию материала за счет увеличения количества степеней свободы в расчетной модели. В то время как метод аппроксимации одним КЭ [5] дает усредненную оценку, но не позволяет адекватно описать направленные свойства неоднородной среды, предлагаемый подход корректно определяет ортотропные характеристики сложных структур с выраженной пространственной ориентацией элементов. Сравнение с методом вычисления реакции на эквивалентную силу [4] показало более высокую точность предлагаемого метода (отклонение 0,06 % против 2,93 %) и его существенную вычислительную эффективность. Необходимость проведения 6 вычислительных экспериментов в методе [4] и процедуры фильтрации сетки обуславливают увеличение времени расчетов более чем в 6 раз. Анализ сеточной сходимости выявил нелинейную зависимость между точностью результатов и вычислительными затратами. Экспоненциальный рост времени вычислений при дальнейшем увеличении плотности сетки делает его нецелесообразным с практической точки зрения.

Высокая точность метода, подтвержденная валидацией на аддитивно изготовленных образцах, открывает возможности для его применения при проектировании медицинских имплантатов [7], неразрушающем контроле [8] и разработке [9] новых материалов с заданными свойствами. К ограничениям можно отнести требование связности конструкции в рассматриваемом элементе объема. Кроме того, как и другие методы гомогенизации, представленный подход наиболее эффективен для материалов с периодической или квазипериодической структурой, где можно выделить представительный элемент объема.

Заключение. В работе разработан и валидирован улучшенный метод численной гомогенизации неоднородных материалов на основе КЭ-ансамбля, использование которого позволяет повысить точность определения эффективных механических свойств, особенно для материалов с выраженной структурной анизотропией. Валидация метода на аддитивно изготовленных образцах подтвердила его высокую точность и вычислительную эффективность. Полученные результаты подтвердили применимость метода для анализа биологических тканей сложной структуры. Разработанный подход открывает перспективы

применения в различных областях проектирования, неразрушающего контроля и разработки новых материалов с заданными свойствами.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда
№ 25-21-00434.*

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] Bolshakov P., Kharin N., Agathonov A., Kalinin E., Sachenkov O. Extension of the Voronoi Diagram Algorithm to Orthotropic Space for Material Structural Design. *Biomimetics*, 2024, vol. 9 (3), art. no. 185.
- [2] Almeida J., Castro S., Leão H., Pitangueira R. Exploring the Influence of Heterogeneity on Determination of a RVE for Concrete Structures. *XLV CILAMCE*, 2024. URL: <https://publicacoes.softaliza.com.br/cilamce/article/view/10251/7296> (accessed 15.02.2025).
- [3] Andreassen E., Andreassen C.S. How to determine composite material properties using numerical homogenization. *Comput. Mater. Sci.*, 2014, vol. 83, pp. 488–495.
- [4] Герасимов О.В., Рахматулин Р.Р., Балтина Т.В., Саченков О.А. Определение механических свойств костной ткани численно-цифровым методом на основе данных компьютерной томографии. *Российский журнал биомеханики*, 2023, т. 27, № 3, с. 53–66.
- [5] Герасимов О.В., Семенова Е.В., Балтина Т.В., Бережной Д.В., Саченков О.А. Метод определения упругих свойств элемента негетерогенной среды на основе данных компьютерной томографии. *Российский журнал биомеханики*, 2024, т. 28, № 3, с. 47–59.
- [6] Kharin N., Akifyev K., Spiridonova K., Statsenko E., Semenova E., Bolshakov P., Sachenkov O. Inter-track porosity and macroporosity insights into mechanical properties of FDM printed samples using in-situ 4D XCT. *Int. J. Mech. Mater. Des.*, 2025. <https://doi.org/10.1007/s10999-025-09780-6>
- [7] Маслов Л.Б., Дмитрюк А.Ю., Жмайло М.А., Коваленко А.Н. Исследование прочности эндопротеза тазобедренного сустава из полимерного материала. *Российский журнал биомеханики*, 2022, № 4, с. 19–33.
- [8] Semenova E., Gerasimov O., Koroleva E., Ahmetov N., Baltina T., Sachenkov O. Automatic processing and analysis of the quality healing of derma injury. *Biomechanics in Medicine and Biology. Advances in Intelligent Systems and Computing*, 2019, vol. 831. https://doi.org/10.1007/978-3-319-97286-2_10
- [9] Zhu B., Skouras M., Chen D., Matusik W. Two-Scale Topology Optimization with Microstructures. *ACM Trans. Graph. Arxiv:1706.03189v1*, 2017, vol. 36 (4).