



# Kuhljevi dnevi 2022

## Zbornik del

*Zbornik del*

***Kuhljevi dnevi 2022***

Portorož, 22. – 23. september 2022

*Uredila:*

**Janko Slavič  
Martin Česnik**





## ***Kuhljevi dnevi 2022***

Portorož, 22. – 23. september 2022

### **ZBORNİK DEL**

#### **Uredila:**

Janko Slavič  
Martin Česnik

#### **Recenzije:**

Milan Batista	Jože Kutin
Miha Brojan	George Mejak
Gregor Čepon	Nikolaj Mole
Martin Česnik	Anatolij Nikonov
Domen Gorjup	Jure Ravnik
Jurij Gregorc	Zlatko Rek
Nenad Gubeljak	Lidija Slemenik Perše
Miroslav Halilovič	Božidar Šarler
Tomaž Hozjan	Matej Vesenjāk
Matjaž Hriberšek	Klemen Zaletelj
Marko Kegl	

#### **Izdalo in založilo:**

SLOVENSKO DRUŠTVO ZA MEHANIKO

Jamova 2, 1000 Ljubljana

september, 2022

#### **Grafično oblikovanje naslovnice:**

Žan Brezec

#### **Cena:**

Knjiga je prosto dostopna na spletni strani  
Slovenskega društva za mehaniko

## ***Kazalo***

- J. Bezjak, B. Hanželič, M. Ramšak, J. Ravnik**  
*Izgradnja in analiza delovanja modela vozila, ki ga poganja veter in se giblje hitreje od vetra* ..... 1 – 8
- M. Borovinšek, Z. Ren**  
*Numerični model obrabe polietilena ultra visoke molekularne mase* ..... 9 – 18
- M. Brojan, J. Zavodnik**  
*Vijačnica iz poliamida kot metamaterial z negativnim koeficientom linearne temperaturne razteznosti* ..... 19 – 26
- U. Gradišar Centa, A. Kralj, M. Halilovič, M. Žnidaršič, L. Slemenik Perše**  
*Reološke in termične lastnosti poliizobutilena-PIB* ..... 27 – 33
- S. K. Chandrashekhara, D. Zupan**  
*Modeliranje mehčanja materiala v prostorskih okvirjih z uporabo formulacije, osnovane na hitrostih* ..... 34 – 41
- U. Cotič, M. Česnik, M. Boltežar**  
*Analiza vpliva kontaktne nelinearnosti na akumulacijo poškodbe pri vibracijskem utrujanju* ..... 42 – 50
- Ž. Donik, B. Nečemer, S. Glodež, J. Kramberger**  
*Numerična analiza mehanskega odziva večslojne kompozitne polimerne strukture žilne opornice* ..... 51 – 60

<b>B. Fortuna, G. Turk, S. Schnabl</b> <i>Numerična analiza lameliranih lepljenih nosilcev z zobatimi spoji</i> .....	61 – 70
<b>T. Gomboc, S. Repnik, M. Hriberšek, J. Iljaž, M. Zadravec</b> <i>Numerično modeliranje razprševanja suspenzije v razpršilnem sušilniku</i> .....	71 – 78
<b>I. D. Horvat, J. Iljaž</b> <i>Numerično reševanje Fourierjevega in ne-Fourierjevega prevoda toplote v biološkemu tkivu</i> .....	79 – 86
<b>B. Kamenik, M. Hriberšek, M. Zadravec</b> <i>Numerična določitev tlačnega padca znotraj vial zaradi geometrije vial s sklopljenim 0D-RDT modelom</i> .....	87 – 94
<b>G. Krivic, J. Slavič</b> <i>Metoda za sočasno brezkontaktno merjenje modula elastičnosti in temperaturnega razteznostnega koeficienta materialov za 3D tisk</i> .....	95 – 104
<b>B. Kurent, B. Brank, N. Friedman</b> <i>Primerjava determinističnega in Bayesovega posodabljanja modela stavbe</i> ..	105 – 110
<b>A. Mauko, M. Ulbin, N. Novak, M. Vesenjajk, Z. Ren</b> <i>Osnosimetrični celični avksetični metamaterial</i> .....	111 – 118
<b>G. Mejak</b> <i>Približni izračun efektivnih kubičnih strižnih modulov</i> .....	119 – 126
<b>M. Mihelčič, U. Gradišar Centa, L. Slemenik Perše</b> <i>Vpliv temperaturnega gradienta ohlajanja na kristalizacijo HDPE in LDPE polimera</i> .....	127 – 134

<b>K. Mramor, R. Vertnik, B. Šarler</b> <i>Vpliv temperature ulivanja na makroizcejanje pri kontinuirnem ulivanju jekla</i> .....	135 – 142
<b>B. Nečemer, S. Glodež</b> <i>Napovedovanje dobe trajanja tankostenskih avksetičnih satovij</i> .....	143 – 150
<b>N. Novak, O. Al-Ketan, M. Vesenjaka, Z. Ren</b> <i>Razvoj in mehanska karakterizacija hibridnih TPMS metamaterialov</i> .....	151 – 159
<b>Š. Obid, M. Halilovič, B. Starman</b> <i>Konstitutivni model za nelinearne anizotropne materiale z nesimetričnim odzivom</i> ....	160 – 167
<b>A. Oseli, L. Slemenik Perše</b> <i>Posreden in neposreden vpliv omrežja iz enostenskih-ogljikovih nanocevk v polietilenu visoke gostote na časovno odvisno mehansko vedenje</i> .....	168 – 175
<b>J. Predan B. Harl, N. Gubeljaka, M. Kegl</b> <i>Zmanjševanje napetosti pri optimizaciji topologije na omejenih domenah</i> ...	176 – 185
<b>M. Ramšak, M. Hriberšek</b> <i>Vpliv stene viala na prenos toplote in hitrost liofilizacije</i> .....	186 – 193
<b>Z. Rek, B. Šarler</b> <i>Metoda temeljnih rešitev za dvofazni Stokesov tok</i> .....	194 – 201
<b>M. Štrakl, J. Wedel, M. Hriberšek, P. Steinmann, J. Ravnik</b> <i>Parametrični model za napoved sil in momentov na superelipsoidne delce v Stokesovem toku</i> .....	202 – 209

<b>I. Tomac, J. Slavič</b> <i>Identifikacija dušenja z uporabo hitre kamere</i> .....	210 – 215
<b>G. Udovč, I. Planinc, T. Hozjan, A. Ogrin</b> <i>Vpliv podajnosti stika na mehanski odziv dvoslojnih prostorskih nosilcev</i> ....	216 – 228
<b>J. Urevc, M. Nabergoj, M. Halilovič</b> <i>Izboljšano določevanje porazdelitvene funkcije orientacije vlaken v polimerih, ojačanih s kratkimi vlakni</i> .....	229 – 237
<b>T. Vrtač, G. Čepon, M. Boltežar</b> <i>Razvoj digitalnih dvojčkov za namen identifikacije poškodovanosti strukture z metodami strojnega učenja</i> .....	238 – 245
<b>J. Wedel, J. Ravnik, M. Hriberšek, M. Štrakl, P. Steinmann</b> <i>Numerična analiza hidrodinamskih razmer med sunkovitim izdihom</i> .....	246 – 253
<b>Y. E. Yilmaz, Z. Ren</b> <i>Merjenje deformacij v visokohitrostnih eksperimentih z algoritmi za odkrivanje robov</i> .....	254 – 261
<b>T. Zadavec, Y. Cui, J. Ravnik</b> <i>Študija učinkovitosti delovanja nebulizatorja za dovajanje zdravil v človeška pljuča</i> ..	262 – 269
<b>J. Zavodnik, M. Brojan</b> <i>Vpliv hitrosti rasti na razvoj deformacijskih vzorcev pri filmih na ravninskih viskoelastičnih substratih</i> .....	270 – 277
<b>J. Zevnik, Ž. Pandur, M. Dular</b> <i>Dinamika kavitacijskega mikromehurčka ob togi steni</i> .....	278 – 285



## *Izgradnja in analiza delovanja modela vozila, ki ga poganja veter in se giblje hitreje od vetra*

*J. Bezjak<sup>1</sup>, B. Hanželič<sup>1</sup>, M. Ramšak<sup>1</sup> in J. Ravnik<sup>1</sup>*

## *Design and analysis of operation of a wind powered vehicle moving faster than the wind*

**Povzetek.** V prispevku so predstavljeni matematični model, izdelava, rezultati meritev in RDT simulacija vozila, ki ga poganja veter, pri čemer vozilo dosega hitrosti, ki so višje od hitrosti vetra. Na vozilu je en par koles povezan, preko stožčaste zobniške dvojice, s propelerjem. Takoj, ko se vozilo začne premikati se začne vrteti kolesa, prav tako pa se začne vrteti propeler. Propeler tako proizvaja dodatno silo, ki poganja vozilo zraven vetra. Tako lahko vozilo doseže večje hitrosti od vetra.

**Abstract.** This article describes the mathematical model, making of, measurements and CFD results of a vehicle, propelled by the wind while going faster than the same wind. The vehicle consists of two pairs of wheels. One pair is connected to a propeller via a conical gear pair. As the vehicle moves it spins the propeller, which generates thrust and thus pushes the vehicle faster than the wind.

### **1 Uvod**

V luči prehoda v trajnostni način življenja so raziskave v smeri izkoriščanja vetrne energije smotrne. V tem prispevku se ukvarjamo s problematiko izdelava vozila na vetrni pogon, ki se lahko giblje v smeri vetra s hitrostjo, ki je večja od hitrosti vetra.

Leta 1969 je Andrew Bauer zgradil vozilo [4], ki je doseglo 1,2-kratno hitrost vetra neposredno v smeri. Jack Goodman [5] je svoje vozilo predstavil 2006 in določil 4 mph za hitrost vetra pri kateri vozilo lahko začne voziti hitreje od vetra. 2. julija 2010 je vozilo Blackbird [2] vozilo 2,8-krat hitreje od vetra in postavilo prvi certificiran svetovni rekord v tej kategoriji. 16. junija 2012 je turbinska različica Blackbird postavila še en svetovni rekord z 2,1-kratno hitrostjo vetra neposredno z vetrom.

Na prvi pogled takšna vozila ne upoštevajo zakonov o ohranitvi energije. Kako lahko vozi hitreje od vetra, ki ga poganja? Od kod dobi energijo? Ali se ta ne izgublja zaradi trenja? Predstavljeni problem je na prvi pogled nemogoče rešiti, a kot smo pokazali v nadaljevanju s pomočjo inženirskega pristopa k obravnavi problema lahko delovanje razumemo in iščemo

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

možnosti za izdelavo optimalne rešitve. Cilj raziskave je bil torej razviti inženirski pristop k obravnavanju nestandardnih izzivov in pokazati kako preko izdelave prototipa, meritev in numeričnih simulacij lahko dosežemo poglobljeno znanje o delovanju in iščemo možnosti za optimizacijo.

V prispevku je izpeljan poenostavljen matematični model obnašanja vozila, glede na različne robne pogoje delovanja vozila. Vozilo je bilo nato tudi izdelano pri čemer je bila večina komponent narejena s pomočjo 3D tiskanja. Sledila je izvedba eksperimenta, kjer smo pridobili podatke meritev za stanja, ki smo jih predhodno izračunali na podlagi postavljenega matematičnega modela in nazadnje še RDT preračun. Nato smo izvedli analizo rezultatov, kjer smo primerjali rezultate meritev in preračunov.

Za razumevanje delovanja vozila [3], moramo razumeti vlogo propelerja in njegovo delovanje. Propeler ne deluje tako kot vetrnica (veter vrtil propeler, ki nato generira potisk) ampak ima propeler podobno vlogo, kot jo imajo propelerji na letalu, le da ga namesto motorja vrtijo kolesa, ter preko prenosa zagotavljajo potisk, ki je proizveden s propelerjem. Da se doseže hitrost večja od vetra, mora propeler dovajati dovolj velik potisk, da lahko premaga sile, ki vozilo zavirajo, kot je sila trenje med kolesi in tlom, ter med zobniki in sila zračnega upora. Na vse te sile pa imajo vpliv različni parametri. Hitrost vetra vpliva na hitrost vozila, in tako tudi na hitrost vrtenja propelerja. Večja kot bo hitrost vetra, hitreje se bo gibalo vozilo in hitreje se bo vrtil propeler, saj je ta povezan s kolesi.

Dimenzije propelerja so pomembne pri generiranju potiska. Tukaj sta pomembni dimenziji korak in premer propelerja. Predvsem je pomembno njuno razmerje, saj so različna razmerja primerna za različne situacije. Delovanje vozila je predvideno pri nižjih hitrostih, okrog 20 km/h. Za te nizke hitrosti so primerni propelerji z razmerjem korak/premer=1/2, t.i. »slowfly« propelerji. Premer koles ima vpliv na obrate gredi in s tem na obrate propelerja. V našem primeru je bilo privzeto prestavno razmerje 1:1.

Propelerji »slowfly« so primerni za obrate pod 5000 obratov/min. Kar pomeni, da morajo imeti izbrana kolesa pri željeni hitrosti manj kot 5000 obratov/min. Prav tako je pomembno tudi razmerje med korakom propelerja in premerom koles, ki mora biti manj kot 0,7.

Pomembni sta tudi masa in oblika vozila. Masa vpliva na pospeševanje vozila. Lažje je vozilo, lažje ga bo veter porinil ter ga propeler poganjal. Oblika vozila vpliva na pretok zraka, torej na zračni upor. Zračni upor je ključen pri samem zagonu vozila, saj samo veter deluje na vozilo.

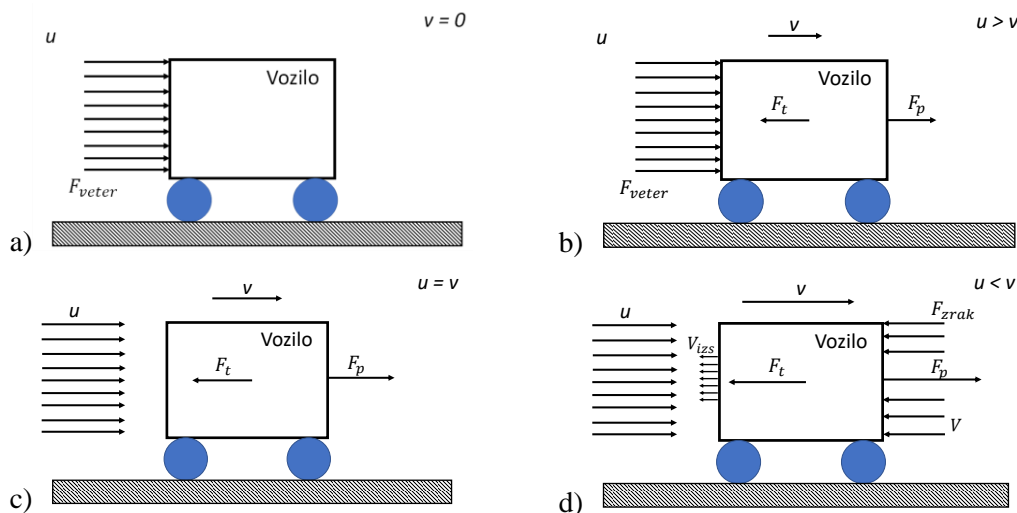
## 2 Fizikalno ozadje

### 2.1 Ohranitev energije

Na začetku, ko vozilo miruje, deluje nanj samo zračni upor zaradi vetra  $F_{veter}$ , ki piha s hitrostjo  $u$ . (slika 1a). Takoj ko se začne vozilo premikati s hitrostjo  $v$ , se pojavi sila propelerja  $F_p$ , ki vozilo potiska v smeri vetra, torej gibanja. Prav tako se pojavijo izgube, ki so združene v  $F_t$ . Ta situacija je prikazana na sliki 1b, kjer je hitrost vozila manjša od hitrosti vetra ( $u > v$ ). Vozilo bo pospeševalo, dokler bo veljal pogoj:  $F_{veter} + F_p > F_t$ .

Ko vozilo doseže hitrost vetra, se pogoji znova spremenijo. Sile, ki delujejo na vozilo, ki se giblje s hitrostjo vetra so prikazane na sliki 1c. Ker je hitrost vozila enaka hitrosti vetra, na vozilo sila vetra  $F_{veter}$  ne deluje več. Edini sili, ki še delujeta, je sila propelerja  $F_p$  in sila izgub  $F_t$ . Če je v tem trenutku sila propelerja  $F_p$  večja od sile izgub  $F_t$ , bo vozilo začelo pospeševati

in bo tako doseglo hitrost večjo od hitrosti vetra  $u$ . Hkrati bo na vozilo deloval zračni upor v zaviralni smeri  $F_{zrak}$ . Potisk propelerja je v tem primeru odvisen samo od vrtljajev, saj sta premer in korak propelerja konstanti. Omenjeno stanje prikazuje slika 1d.



**Slika 1:** Ob začetku vozilo miruje a), nato se giblje počasneje od vetra b), doseže hitrost vetra c) in se giblje hitreje od vetra d).

Vozilo bo doseglo najvišjo hitrost pri ravnovesju:

$$F_p = F_t + F_{zrak} \quad (1)$$

Trenje in ostale mehanske izgube modeliramo kot  $F_t = mgk_t$ , kjer je  $m$  masa vozila,  $k_t$  koeficient. Zračni upor zapišemo s kvadratnim zakonom  $F_{zrak} = 1/2A\rho c_d(u - v)^2$ , kjer je  $A$  čelni presek vozila,  $\rho$  gostota zraka in  $c_d$  koeficient upora. Silo propelerja [6] zapišemo spremembe gibalne količine zraka  $F_p = \dot{m}(v_{izs} - v)$ . Upoštevamo naslednji izraz za pretok zraka  $\dot{m} = \rho A_p v_{izs}$  in izpeljemo

$$F_p = \rho \frac{\pi d^2}{4} (v_{izs}^2 - v_{izs}v), \quad (2)$$

kjer je  $d$  premer propelerja. Izstopno hitrost zraka  $v_{izs}$  ocenimo s pomočjo vrtljajev  $n$  in koraka  $p$  propelerja:  $v_{izs} = np$ . Nazadnje vpeljemo inženirski popravek, ki izraz (2) popravi v formulo, ki velja za propeler, ki smo ga uporabili na vozilu [6,7]:

$$F_p = 1,225 \frac{\pi(0,0254d)^2}{4} \left[ \left(0,0254 \cdot \frac{np}{60}\right)^2 - \left(0,0254 \cdot \frac{np}{60}\right)(v - u) \right] \left(\frac{d}{3,29456 \cdot p}\right)^{1,5} \quad (3)$$

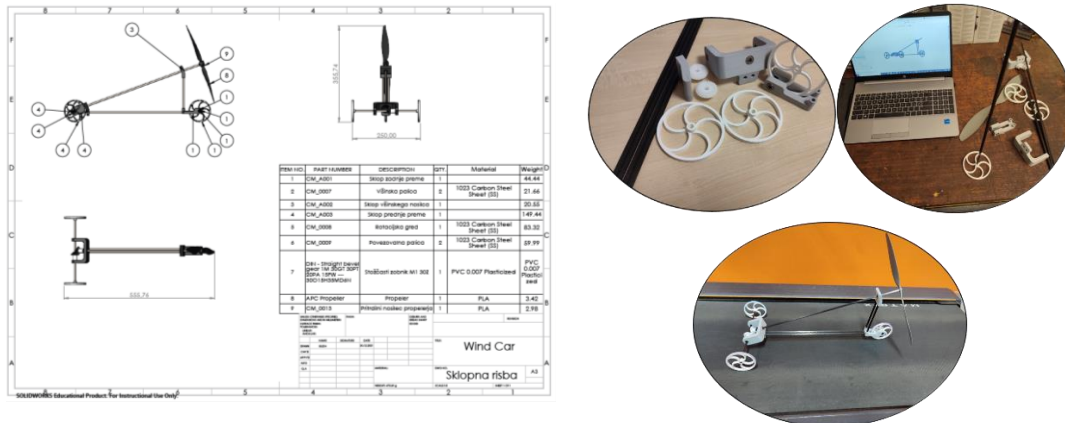
V tem izrazu vstavimo premer in korak propelerja v inčih, vrtljaje v obratih na minuto, hitrosti pa v metrih na sekundo. Izrazi zapisani zgoraj nam ob upoštevanju različnih scenarijev, ki so prikazani na sliki 1, omogočajo izračun sile na vozilu pri različnih hitrostih.

### 3 Izdelava vozila

V začetni fazi je bilo potrebno skonstruirati obliko vozila. Modeliranje je bilo izvedeno v programskem paketu Solidworks 2021, kjer je bil izdelana tudi tehnična dokumentacija, za



mehansko obdelavo komponent. Večina komponent je bila narejena s pomočjo 3D tiskanja, gredi in povezovalne palice so bile narejene iz karbona, ter stožčasta zobniška dvojica iz materiala PLA. Gredi so bile na vpetvenih mestih uležajene s krogličnimi ležaji. Izbran je bil propeler tipa »slowfly« 12x4,7 premera  $d = 355,6$  mm in koraka  $p = 11,94$  mm. Čelni preseki vozila  $A = 186,7$  cm<sup>2</sup>, masa  $m = 0,5$  kg, premer koles  $d_k = 80$  mm, vozilo je dolgo 55 cm in široko 25 cm, Slika 2 prikazuje sklopno risbo in fotografije izdelanega vozila.



Slika 2: Sklopna risba (levo) in fotografije izdelanega vozila (desno).

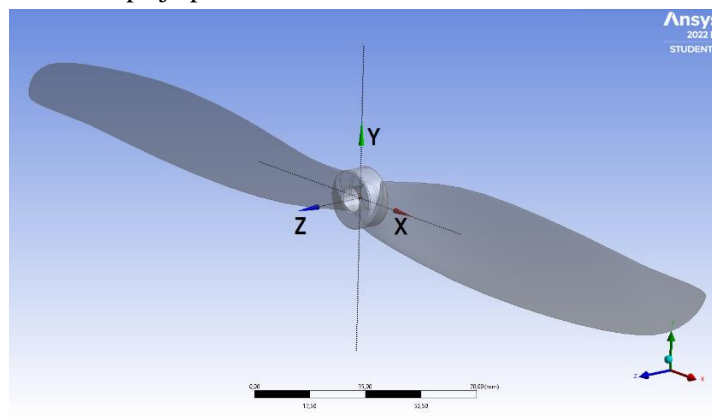
#### 4 Meritve

Izvedli smo eksperiment s katerim smo izmerili potisno silo propelerja in dokazali, da je dovolj velika, da se vozilo lahko giblje hitreje od vetra. Eksperiment smo izvedli v koordinatnem sistemu vozila tako, da smo vozilo položili na premikajočo tekaško stezo. Hitrost premikanja traku na stezi smo nastavili na 20,0 km/h, saj pri tej hitrosti vozilo deluje v optimalnih pogojih. Vozilo smo preko vzmeti držali v ravnovesju. Uporabili smo palico, ki je hkrati služila kot držalo in kot vodilo za vzmet. Vzmet je bila na eni strani pritrjena na vozilo, potisnjena v palico in na drugi s sekundnim lepilom prilepljena na palico. Hkrati je bilo na vozilo pritrjeno merilo, s katerim smo odčitavali raztezke s pomočjo kamere, ki je bila postavljena pravokotno na merilo. Zajemali smo 30 slik na sekundo. Na podlagi analize posnetka je bilo odčitanih 10 meritev, saj vozilo ni popolnoma mirovalo. Preko meritve raztezka vzmeti, znane konstantne vzmeti (0,089 N/mm) in Hookovega zakona smo izračunali silo. Izmerjen raztezek vzmeti je bil  $x = 5 \pm 0,23$  mm in s tem sila  $F_{20} = 0,44 \pm 0,02$  N. Glede na izbrani premer koles in prestavno razmerje 1:1 se je propeler med eksperimentom vrtel s 1326 obrati na minuto. Te obrate smo izračunali iz hitrosti tekaške proge, tj. 20 km/h, in iz premera koles,  $d_k = 80$  mm. Ugotovili smo, da se vozilo začne gibati v smeri tekaške steze ob hitrosti 20,0 km/h. Takrat zračnega upora ni, ostale sile v ravnovesju  $F_t = F_p$ . Od tod smo izračunali koeficient  $k_t = 0,1181$ .

## 5 RDT analiza

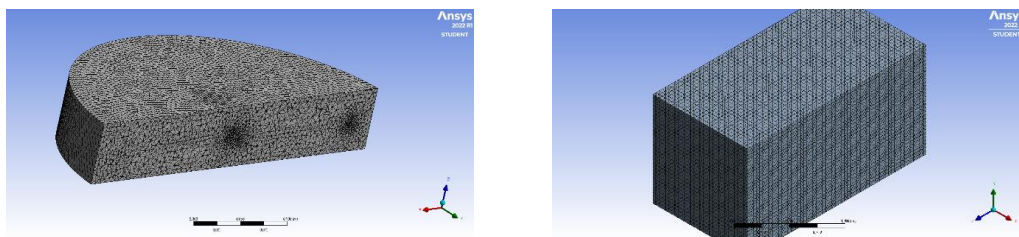
Za boljše razumevanje vpliva in delovanja propelerja je bila izvedena RDT analiza na samem propelerju. Zanimalo nas je kako se spreminja potisk propelerja pri različnih obratih ter kakšen je vpliv dohodnega zraka na propeler, torej vpliv relativne hitrosti med hitrostjo vetra in hitrostjo vozila. Uporabili smo programski paket ANSYS Fluent [1] s študentsko licenco. Simulacije smo izvedli stacionarno, izotermno, s zrakom kot nestisljivo tekočino. Lastnosti zraka smo povzeli pri temperaturi 15 °C.

Za simulacijo je bil izbran propeler premera 13 inch, kar je enako 330,2 mm ter s korakom 5 inch, kar ustreza 127 mm. Propeler z koordinatni sistemom je prikazan na sliki 3. Model se tako vrti okoli Z osi, X os pa je prečno na tok.



**Slika 3:** 3D model propelerja s katerim je bila izvedena numerična simulacija

Okoli propelerja smo definirali cilindrično domeno. Z uporabo Boolove operacije odštevanje smo to domeno povezali s propelerjem tako, da je v sami domeni ostala luknja v obliki propelerja. Ta domena se je v simulaciji vrtela s predpisanimi vrtljaji in bo predstavljala vrtenje propelerja. Drugo domeno je v obliki škatle smo postavili okoli prve domene in predstavlja okoliški zrak. Ta domena mora biti dovolj velika, da robovi te domene zanemarljivo vplivajo na tok zraka. Cilindrična domena je bila nato zamrežena s finimi elementi, medtem ko je bila škatlasta domena bila zamrežena z grobimi, prikazano na sliki 4. Skupno je bila celotna računska mreža izdelana iz 426430 tetraedričnih elementov.



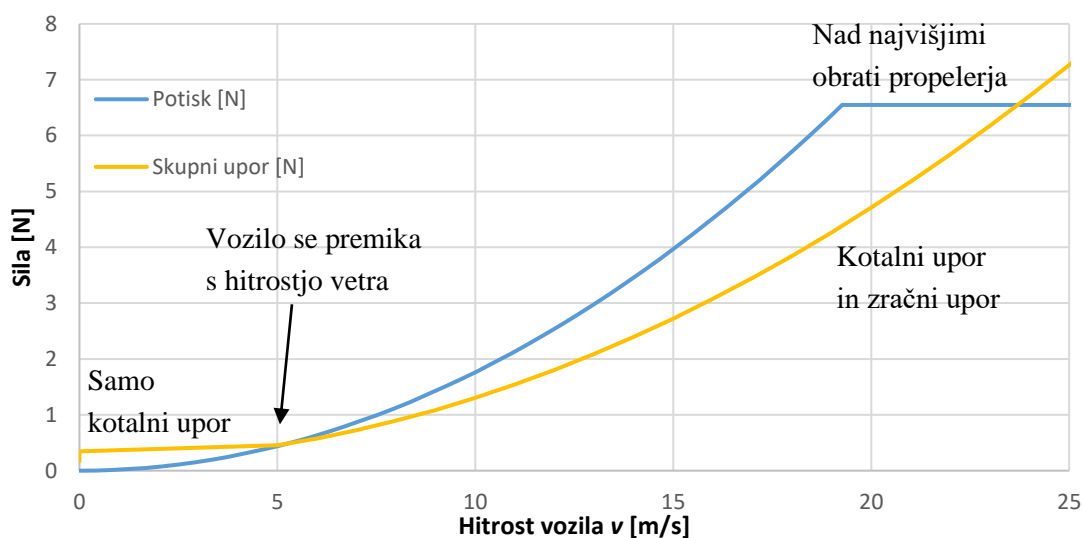
**Slika 4:** Računska mreža cilindrične in zunanje domene

Na zunanji domeni smo na sprednji ploskvi, proti kateri bi se vozilo premikalo, predpisali vstopni robni pogoj za hitrost tekočine, ki je ustrezal relativni hitrosti zraka. Na nasprotni strani je bil predpisan tlačni izstopni robni pogoj. Na ostalih stenah smo predpisali odprtino. Za celotno cilindrično domeno je bila predpisana rotacija okoli Z osi, na površini propelerja pa ni

bilo zdrsa tekočine. Uporabili smo k-epsilon turbulentni model. Izračun smo ustavili, ko je sila na propeler dosegla stacionarno stanje. To se je zgodilo po 1250 iteracijah.

## 6 Rezultati

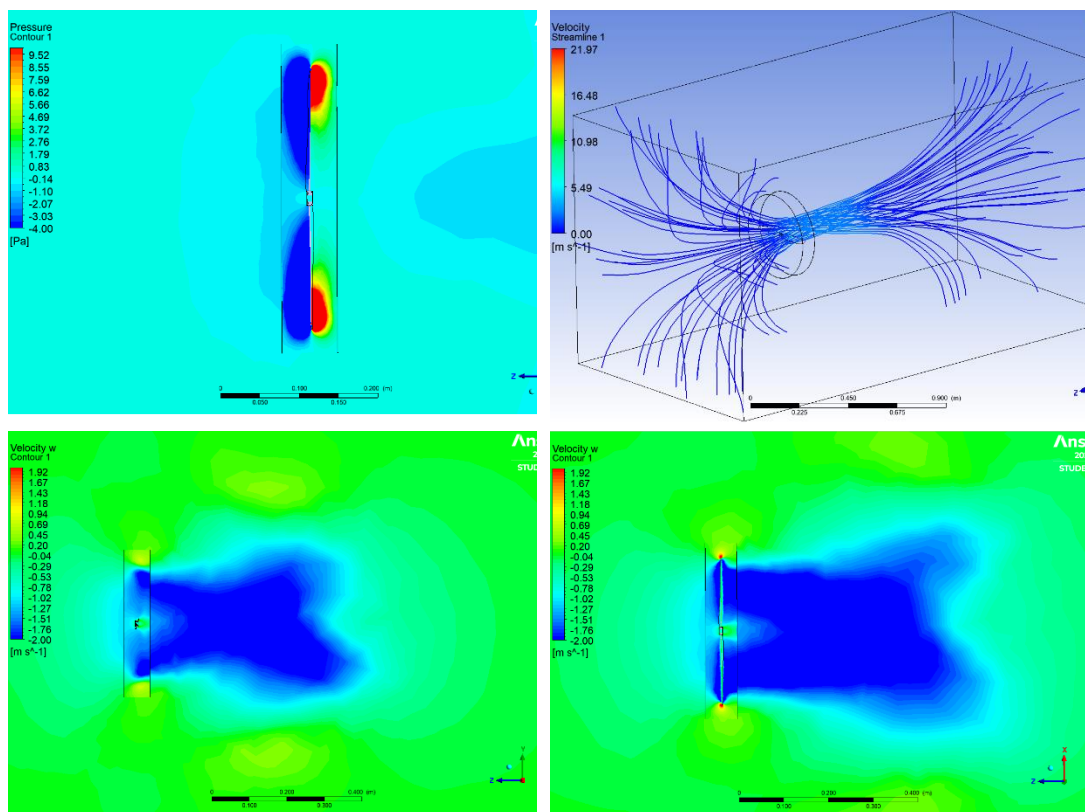
Na sliki 5 prikazujemo graf potiska  $F_p$  (3) in skupen upor  $F_t + F_{zrak}$  v odvisnosti od hitrosti vozila. Upoštevali smo hitrost vetra  $u = 5$  m/s, kar pomeni, da pri tej hitrost začne delovati tudi zračni upor relativnega zraka  $V = u - v$ . Iz grafa je razvidno, da pri tej hitrosti vetra pridelamo potisk, ki je enak seštevkju uporov. Po omenjeni hitrosti vozilo dosega višje hitrosti od hitrosti vetra. Pri 19 m/s doseže vozilo maksimalen potisk, saj je bil uporabljen »Slowfly« propeler, ki ima optimalno delovno območje omejeno, da na primeru vozila dosegamo maksimalno potisno silo cca. 8 N.



**Slika 5:** Graf potiska v odvisnosti od hitrosti vozila pri hitrosti vetra  $u = 5$  m/s. Vidimo, da je potisk večji od skupnega upora vse dokler smo v delovnem območju propelerja.

Pri hitrosti 20 km/h smo izmerili silo propelerja  $F_{20} = 0,44 \pm 0,02$  N. Teoretični izračun potiska  $F_p$  iz enačbe (3) pri tej hitrosti pokaže vrednost  $F_{20,teor} = 0,58$  N. Vidimo, da se rezultati meritev skladajo z redom velikosti rezultatov preračuna pri čemer prihaja do določenih razhajanj, saj v teoretičnem izračunu zelo grobo modeliramo vpliv trenja v stožčasti zobniški dvojici, trenja med kolesi in tlemi, trenju v mehanizmu zmeti in trenju v ležajih.

Rezultati RDT analize so grafično prikazani na sliki 6. Pri tlačnem polju, slika 6 levo, opazimo tlačno razliko pred in za propelerjem. Iz tlačne razlike lahko sklepamo, da propeler deluje tako kot pričakovano, saj je pred propelerjem manjši tlak kot za propelerjem. Enako lahko sklepamo tudi iz hitrostnih polj po dveh prerezih, slika 6 spodaj, kjer obe hitrostni polji prikazujeta hitrost zraka v smeri Z osi. Leva slika je v prerezu YZ osi, medtem ko je desna slika v prerezu XZ. Pri obeh je hitrost zraka za propelerjem večja in v nasprotni smeri Z osi. Prikazane so tudi tokovnice zraka po celotnem prostoru. Iz tokovnic je razvidno vrtnčenje zraka za propelerjem. Prav tako je po svetlejši barvi razvidna večja hitrost zraka, kar potrjujeta obe hitrostni polji.



**Slika 6:** Rezultati RDT analize: potek tlaka na propelerju (levo), tokovnice (desno), hitrostno polje po dve prerezih (spodaj)

Primerjavo med RDT analizo in teoretičnim izračunom podajamo v tabeli 2. Rezultat simulacije je vsota sil na propeler v smeri osi Z. Torej, kadar je ta pozitivna, se propeler giblje v smeri Z osi, kadar pa je negativna pa se giblje v nasprotni smeri Z osi. Če je vsota sil negativna, lahko sklepamo, da je zračni upor večji od potiska in propeler tako ne deluje več. S tem računskim modelom bi lahko poiskali največjo dosegljivo hitrost propelerja tako, da bi spreminjali vrtljaje in vstopne hitrosti, dokler ne bi našli idealne kombinacije.

**Tabela 2:** Primerjava potisne sile RDT analize in teoretičnega preračuna

Številka simulacije	Obrati propelerja [RPM]	Vstopna hitrost $\left[\frac{m}{s}\right]$	Potisna sila (simulacija) [N]	Potisna sila en. (3) [N]	Razlika [N]
1	400	0	0,037302	0,052698	-0,015396
2	400	2	-0,054940	-0,071785	0,016845
3	400	4	-0,15604	-0,19627	0,04023
4	1260	0	0,37112	0,52289	-0,15177

Tabela 2: Nadaljevanje

Številka simulacije	Obrati propelerja [RPM]	Vstopna hitrost $\left[\frac{m}{s}\right]$	Potisna sila (simulacija) [N]	Potisna sila en. (3) [N]	Razlika [N]
5	1260	2	0,22690	0,13077	0,09613
6	1260	4	-0,12637	-0,26135	0,13498
7	2500	0	1,46936	2,0585	-0,58914
8	2500	2	1,37176	1,2805	0,09126
9	2500	4	0,86835	0,50247	0,36588

Izvedli smo tudi simulacijo pri 1326 obratih na minuto brez vstopne hitrosti, kar ustreza hitrosti 20 km/h. Simulacija je pokazala vrednost 0,41 N, kar je primerljivo z izmerjeno vrednostjo  $F_{20} = 0,44 \pm 0,02 \text{ N}$  in s teoretičnim izračunom potiska  $F_p$  iz enačbe (3)  $F_{20,teor} = 0,58 \text{ N}$ .

## 7 Zaključek

Rezultati meritev, računalniških simulacij in teoretičnega izračuna so pokazali, da obravnavano vozilo dosega hitrosti večje od vetra ob predpostavki, da veter piha s konstantno hitrostjo, tako po prostoru kot po višini. Pokazali smo, da je pristop k načrtovanju, ki smo ga izbrali, torej izdelava prototipa, izvedba meritev in numerična simulacija pravilen pristop, ki omogoča najbolj podrobno raziskavo delovanja izdelka in odpira možnosti za optimizacijo.

Tako eksperimentalni model kot simulacijski bi se lahko nadgradili za boljše razumevanje oziroma natančnejše rezultate. Eksperimentalnemu modelu bi lahko na tekaško progo dodali ventilator, ki bi simuliral relativno hitrostjo zraka, medtem ko bi lahko pri simulacijskem izboljšali natančnost izračuna z gostejšo računsko mrežo.

## Literatura

- [1] Ansys Fluent, programski paket za RDT, Ansys Inc, 2022
- [2] Black bird (wind powered vehicle), [https://en.wikipedia.org/wiki/Blackbird\\_\(wind-powered\\_vehicle\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Blackbird_(wind-powered_vehicle)), dostop: 23.6.2022
- [3] Down wind faster than the wind, <http://dwftw.blogspot.com/#2>, dostop: 23.6.2022
- [4] Faster than the wind, [https://de.zxc.wiki/wiki/Schneller\\_als\\_der\\_Wind\\_segeln](https://de.zxc.wiki/wiki/Schneller_als_der_Wind_segeln), dostop: 23.6.2022
- [5] Jack Goodman, Down wind faster than the wind, Journal of the Amateur Yacht Research Society, 2006, [www.ayrs.org](http://www.ayrs.org)
- [6] Propeller Static & Dynamic Thrust Calculation - Part 2 of 2: <https://www.electricaircraftguy.com/2014/04/propeller-static-dynamic-thrust-equation-background.html>, dostop: 23.6.2022
- [7] Shethal Thomas Kodiyattu. Design of a propeller for downwind faster than the wind vehicle, magistrsko delo, San Jose State University, 2011



## *Numerični model obrabe polietilena ultra visoke molekularne mase*

*Matej Borovinšek<sup>1</sup> in Zoran Ren<sup>1</sup>*

### *Wear Computational Model of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene*

**Povzetek.** Polietilen ultra visoke molekularne mase se v ortopediji uporablja za drsne dele umetnih sklepov. Napovedovanje njegove obrabe je ključnega pomena za izboljšave in razvoj novih umetnih sklepov. Obrabo se navadno napove na osnovi triboloških meritev, vse pogosteje pa tudi s pomočjo ustreznih računalniških modelov. V prispevku je opisan Archardov numerični model obrabe, ki je vgrajen v odprto-kodni programski paket za izvajanje numeričnih analiz po metodi končnih elementov PrePoMax. Model in programski paket sta bila uporabljena za izvedbo numerične analize obrabe vzorcev iz polietilena ultra visoke molekularne mase.

**Abstract.** Ultra-high molecular weight polyethylene is widely used in orthopaedics as a material for sliding parts of artificial joints. Predicting its wear is crucial for improvements and the development of new artificial joints. Tribological measurements are traditionally used for wear prediction. However, some successful computational models have been developed lately. This paper describes the application of the Archard's wear model into an open-source software package PrePoMax for computational analyses based on the finite element method. The model and the package were used to conduct computational wear analyses of ultra-high molecular weight polyethylene samples.

## **1 Uvod**

Polietilen z ultra visoko molekularno maso (UHMWPE) je material, ki se zaradi svojih dobrih mehanskih lastnosti, kot so odlično razmerje med trdnostjo in maso, odpornost proti obrabi, nizek koeficient trenja in samo-mazalne lastnosti, uporablja v številnih inženirskih aplikacijah, med drugim tudi v ortopediji za umetne sklepe v kolenskih, kolčnih in hrbtencičnih protezah [7]. Večina umetnih sklepov je zasnovanih tako, da je stična oziroma drsna površina sklepa na eni strani obdana s polimernim materialom, ki ima vlogo drsnega ležaja zgloba (drsni vložek). Kljub dobrim lastnostim materiala UHMWPE, je obraba v obliki odlomljenih delcev pogosto vzrok razgradnje kosti (osteolize), kar vodi do popuščanja in neizbežne okvare vsadka in pogojuje popolno zamenjavo proteze.

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

Problem obrabe drsnih vložkov umetnih sklepov proučujejo številni raziskovalci s pomočjo triboloških testov, ki služijo kot učinkovito predklinično orodje za raziskovanje značilnosti obrabe umetnih sklepov in pomagajo pri njihovem nadaljnjem razvoju [15]. V zadnjem času se v raziskavah na področju umetnih sklepov vse pogosteje uporabljajo tudi računalniške tribološke numerične analize obrabe po metodi končnih elementov (MKE) [12].

Optimalno debelino plasti polietilena je v raziskavi življenjske dobe umetnega kolena proučeval Alsamhan A. M. [1]. Obravnaval je komercialno dostopne debeline 8 mm, 9 mm in 10 mm. Z uporabo numeričnih analiz je proučeval kontaktne tlake in primerjalne von Misesove napetosti na osnovi 3D modelov protez. Ugotovil je, da povečanje debeline polietilena ojača sam polietilenski vložek, tako so vložki z debelino 10 mm najbolj priporočeni predvsem za aktivne paciente in starejše ljudi.

Pakhaliuk V. in sodelavci [11] so analizirali obrabo umetnega krogelnega sklepa kolčne proteze z vložkom iz UHMWPE. S pomočjo MKE numeričnih analiz so najprej določili kontaktne tlake umetnega krogelnega sklepa, nato pa določili obrabo s pomočjo klasične Archard-Lancasterjeve enačbe in koeficienta obrabe odvisnega od kontaktnega tlaka. Primerjava rezultatov razvitega matematičnega modela in podatkov, pridobljenih iz eksperimentalnih testov materiala UHMWPE je pokazala zelo dobro ujemanje med izmerjeno in izračunano linearno in prostorninsko obrabo.

Raziskavo o numerični analizi napetosti v obrabnih conah umetnega kolenskega sklepa je opravil Nabrdalik M. [10], pri čemer je spreminjal geometrijo polietilenskega tibialnega vložka. Ugotovil je, da ustrezna prilagoditev geometrije vložka omogoča zmanjšanje kontaktnih tlakov in da uporaba vložkov iz polietilena povzroči nižje in enakomerneje razporejene kontaktne tlake.

Innocenti B. in sodelavci [6] so razvili in potrdili numerični model umetnih kolenskih sklepov za napovedovanje obrabe polietilenskih vložkov. Najprej so numerični model umerili in potrdili na triboloških eksperimentih valjčka na plošči, nato so ga uporabili za napoved življenjske dobe modela kolena, kjer je primerjava z eksperimentalnimi meritvami pokazala zelo dobro ujemanje rezultatov.

Numerični model abrazivnih testov materiala UHMWPE so razvili De la Mora Ramirez T. in sodelavci [8]. Numerični model so pripravili v programskem paketu Abaqus, kjer so obrabo simulirali s pomočjo Archardove enačbe in uporabo podprograma UMESHMOTION.

Iz opravljenih raziskav je razviden pomen numeričnih metod pri proučevanju obrabe drsnih vložkov umetnih sklepov. V omenjenih raziskavah je bilo veliko časa namenjenega izdelavi numeričnih modelov obrabe, saj ustrezni modeli obrabe niso bili vgrajeni v uporabljene numerične pakete. Na podlagi teh ugotovitev je bil model obrabe vgrajen tudi v odprtokodni programski paket za izvajanje MKE numeričnih analiz PrePoMax [3], [9] in s tem omogočil bodoče raziskave na področju obrabe s tem paketom.

V nadaljevanju tega prispevka je opisan model obrabe, vgrajen v programski paket PrePoMax in potrditev ustreznosti njegovega delovanja s pomočjo primerjave rezultatov numeričnih analiz z rezultati eksperimentalnega testiranja obrabe materiala UHMWPE za namen uporabe v drsnih vložkih v umetnih sklepih iz literature [13].

## **2 Model obrabe**

V programski paket PrePoMax je bil vgrajen linearni Archardov model obrabe [2], ki je bil razvit za napovedovanje prostornine obrabljenega materiala. Model je bil v osnovi razvit na



podlagi eksperimentalnih rezultatov ciklične obrabe kovinskih preizkušancev v suhih kontaktni pogojih. Model se v obliki enačbe zapiše kot:

$$V = k \cdot \frac{F}{H} \cdot s \quad (1)$$

kjer je  $V$  prostornina obrabljenega materiala,  $k$  je brezdimenzijski koeficient obrabe,  $F$  je normalna kontaktna sila,  $H$  je trdota površine v kontaktu in  $s$  predstavlja drsno razdaljo.

Opisan model, ki zanemari spremembo v geometriji kontaktnih površin med posameznimi cikli obrabe, lahko pri uporabi v MKE numeričnih analizah razdelimo na več korakov in s tem upoštevamo tudi spremembo geometrije kontaktnih površin. Za uporabo v več koračnem numeričnem postopku, kjer je treba za vsak cikel obrabe izračunati spremembo globine obrabe [14], se enačba (1) zapiše v naslednji obliki:

$$h_i = \int \frac{k}{H} \cdot p_i \cdot ds \quad (2)$$

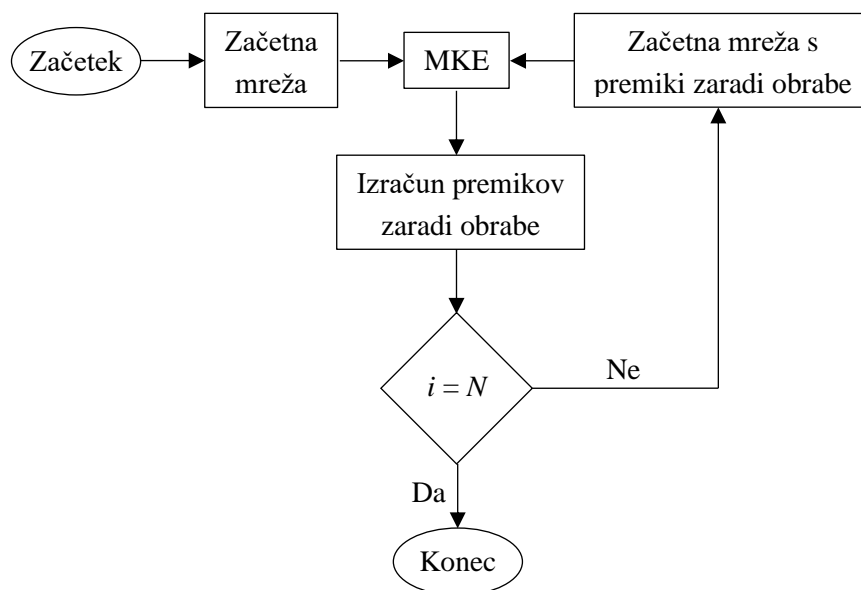
kjer  $h_i$  predstavlja globino obrabe v  $i$ -tem ciklu obrabe in  $p_i$  predstavlja normalni kontaktni tlak. Skupna globina obrabe po več ciklih se nato izračuna s seštevanjem globin obrabe posameznih ciklov. Takšen model omogoča izvedbo analize obrabe, ki je neodvisna od geometrije modela, od uporabljenih robnih pogojev in obremenitev.

Več koračna metoda, vgrajena v PrePoMax, temelji na naslednjih predpostavkah:

- celoten proces obrabe je mogoče razdeliti na več ponavljajočih se ciklov obrabe,
- do obrabe pride le na mehkejši površini v kontaktnem paru (odvisna površina),
- sprememba geometrije kontaktnih površin med enim ciklom obrabe je zanemarljiva,
- brezdimenzijski koeficient obrabe ostane konstanten med celotnim procesom obrabe.

V posameznem ciklu obrabe je potrebno pripraviti model končnih elementov posameznega cikla obrabe. Model mora natančno ujeti razvoj spreminjajočih se kontaktnih pogojev med enim ciklom, zato je potrebna nelinearna časovno odvisna analiza, ki je izvedena s pomočjo odprtokodnega programa CalculiX [5]. Izračun obrabe enega cikla se začne po zaključku napetostno-deformacijske analize kontaktnih pogojev. Vsi parametri obrabe se računajo le v tistih vozliščih končnih elementov odvisne površine, ki so bila med ciklom obrabe v aktivnem kontaktu z glavno površino. Normalni kontaktni tlaki v vozliščih  $p$  in vrednosti vozliščne relativne drsne razdalje  $ds$  se izračunajo iz rezultatov polj uporabljenega kontakta. Globine obrabe v vozliščih se nato izračunajo z uporabo enačbe (2) in upoštevanjem materialnih lastnosti v vozliščih. Obdelava posameznega cikla obrabe se zaključi z izračunom spremembe geometrije kontaktne površine zaradi obrabe, ki jo določajo premiki v vozliščih, izračunani iz globine obrabe. Vozliščni premiki zaradi obrabe v vsakem ciklu se izračunajo tako, da se skalarna vrednost globine obrabe vozlišča pomnoži s smerno normalo površine vozlišča. Premiki zaradi obrabe v zadnjem ciklu skupaj s premiki zaradi obrabe v prejšnjih ciklih predstavljajo skupne premike zaradi obrabe. Le ti se nato upoštevajo med samodejno pripravo modela za naslednji cikel obrabe, kjer se začetna, nedeformirana mreža končnih elementov modela posodobi s skupnimi premiki zaradi obrabe (slika 1).





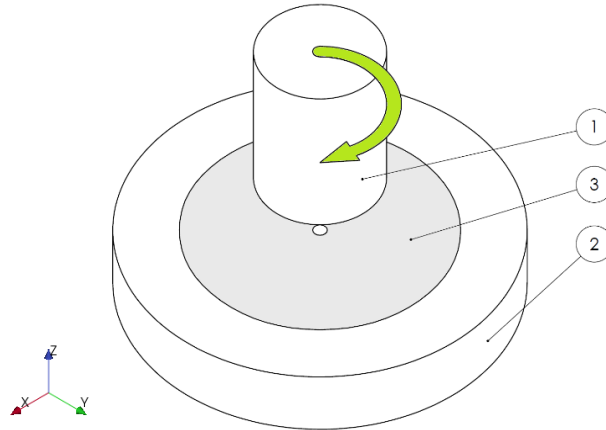
**Slika 1:** Diagram poteka več koračne analize obrabe;  $i$  - trenutni korak;  $N$  - izbrano končno število korakov.

### 3 Eksperimentalne meritve obrabe

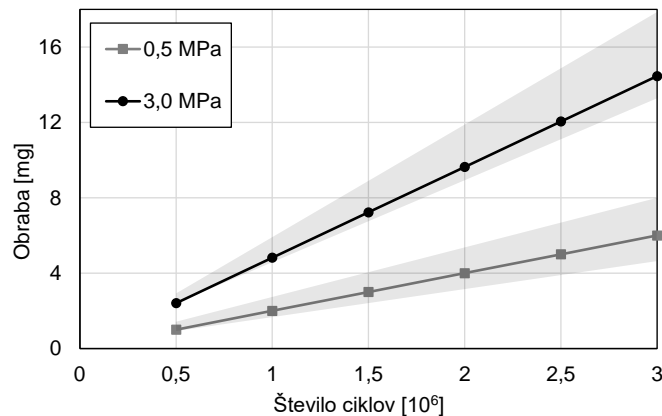
Za potrditev rezultatov numeričnih analiz je bila narejena njihova primerjava z rezultati eksperimentalnih meritev. Rezultati eksperimentalnih meritev so bili povzeti po raziskavi objavljeni v literaturi [13]. V tej raziskavi so bili opravljeni eksperimentalni testi obrabe materiala UHMWPE na tribometru valjček-disk. Valjčki so bili izdelani iz osnovnega materiala UHMWPE s premerom 9,0 mm in višino 12,0 mm. Pred uporabo so bili valjčki sterilizirani, podobno kot pred vgradnjo v umetne sklepe. Valjčki so opravljali krožno pot s premerom 10,0 mm, brez rotacije okrog njihove osi. Drseli so po diskah premera 28 mm in debeline 10 mm, ki so bili narejeni iz biokompatibilne zlitine kobalt-krom (CoCr ISO 5832-12) in polirani na hrapavost površine  $R_a = 0,01 \mu\text{m}$  (slika 2). Za mazanje je bil uporabljeno mazivo alpha calf proizvajalca HyClone mešano z vodo v razmerju 1:1.

Valjček je en cikel poti opravil v času 1 s, torej s hitrostjo gibanja valjčka 31,4 mm/s in frekvenco cikla 1 Hz. Kontrola obrabe je bila izvedena s tehtanjem valjčkov in izračunom primanjkljaja mase materiala zaradi njegove obrabe glede na začetno maso valjčkov. Zaradi zahtevane natančnosti tehtanja je bilo za vsako meritev izvedenih 3 milijone ciklov (v trajanju 6 tednov), z vmesnim tehtanjem na vsakih 0,5 milijona ciklov.

Preizkusi so bili izvedeni za 10 različnih nominalnih kontaktnih tlakov od 0,5 MPa do 3,0 MPa z 10-imi valjčki za vsak tlak. Za primerjavo z numeričnim modelom so bili izbrani povprečni rezultati hitrosti obrabe desetih valjčkov pri najnižjem in najvišjem tlaku (slika 3), saj v prispevku niso določili brezdimenzijskega koeficient obrabe  $k$  in trdote površine v kontaktu  $H$ . Povprečna hitrost obrabe pri nominalnem tlaku 0,5 MPa je znašala  $2,00 \text{ mg}/10^6$  ciklov s standardno deviacijo  $0,32 \text{ mg}/10^6$  ciklov in  $4,82 \text{ mg}/10^6$  ciklov s standardno deviacijo  $0,48 \text{ mg}/10^6$  ciklov pri nominalnem tlaku 3,0 MPa.



**Slika 2:** Izvedba testa obrabe; zelena puščica prikazuje gibanje valjčka (1) po disku (2); celotna kontaktna površina diska je obarvana sivo (3).



**Slika 3:** Eksperimentalno določena obraba pri nominalnem tlaku 0,5 MPa in 3,0 MPa; sivo območje prikazuje raztros rezultatov.

#### 4 Numerične analize

Numerični model je bil sestavljen iz valjčka in diska. Valjček iz materiala UHMWPE je bil modeliran v celoti, medtem ko so preliminarne analize pokazale, da so deformacije na disku iz kobalt-kromove zlitine zanemarljive. Tako je bil v numeričnem modelu zajet le tisti del diska, kjer je prišlo do kontakta med valjčkom in diskom. Modeliran je bil disk premera 15 mm in debeline 1 mm.

Oba uporabljena materiala sta bila modelirana s pomočjo linearno-elastičnega materialnega modela. Za material UHMWPE so bili uporabljeni parametri  $E = 950$  MPa in  $\nu = 0,33$ , za kobalt-kromovo zlitino pa  $E = 210.000$  MPa in  $\nu = 0,29$  [16]. Dodatno je bilo potrebno za analizo obrabe za material UHMWPE določiti brezdimenzijski koeficient obrabe  $k$  in trdoto materiala  $H$ . Vrednost teh dveh parametrov je bila določena v obliki njunega količnika  $k/H$  v

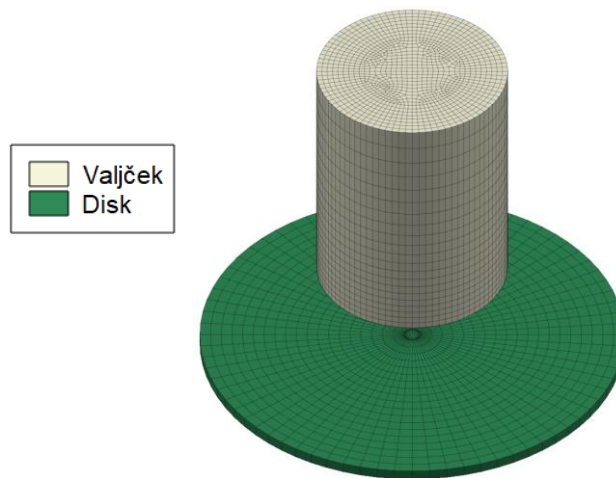
enačbi (2), in je znašala  $4,322 \times 10^{-9} \text{ MPa}^{-1}$ . Določena je bila inverzno, na podlagi najboljšega ujemanja z eksperimentalnimi rezultati.

Med valjčkom in diskom je bil predpisan kontakt, kjer je bila spodnja površina na valjčku izbrana kot odvisna površina, zgornja površina na disku pa kot glavna površina v kontaktu (slika 2). Uporabljen je bil kontakt s kazensko metodo tipa površina-površina. Glede na literaturo [4], znaša koeficient trenja med materialom UHMWPE in kobalt-kromovo zlitino med 0,05 in 0,15. V numeričnem modelu je bila uporabljena srednja vrednost koeficient trenja 0,1.

Med eksperimentom se je premikal valjček, disk je miroval. Zaradi lažjega opazovanja rezultatov na valjčku je v numeričnem modelu valjček miroval, disku pa je bilo predpisano ustrezno gibanje. Na zgornji površini valjčka so bili onemogočeni pomiki v x in y koordinatni smeri. Na spodnji površini diska je bila predpisana nepomična podpora v smeri z osi in pomična podpora v smeri osi x in y, ki je disk brez rotacije premikala vzdolž krožne poti premera 10 mm (smeri osi so prikazane na sliki 2). Valjček je bil na zgornji strani obremenjen s tlačno silo, ki je bila enaka 31,81 N in 190,85 N, da je na kontaktu zagotovila nominalni tlak 0,5 MPa in 3,0 MPa.

Mreža končnih elementov je bila določena s pomočjo konvergenčne analize glede na razporeditev kontaktnih tlakov. V izbrani mreži valjčka je 25.179 elementov in 27.214 vozlišč, v mreži diska pa 1582 končnih elementov in 3230 vozlišč. Uporabljeni so bili osem vozliščni linearni končni elementi oblike heksaedra (slika 4).

Izvedene so bile nelinearne statične numerične analize z upoštevanjem velikih deformacij s programskim paketom CalculiX. V vsakem koraku obrabe je bil premik diska po krožni poti razdeljen na 10 delov, torej kot zasuka  $36^\circ$  na posamezen del. Zaradi velikega števila eksperimentalno izvedenih ciklov je bila uporabljena predpostavka, da je obraba v 100.000 zaporednih ciklih enaka. Tako je bil za vsakih 100.000 eksperimentalnih ciklov izveden le en cikel numerične analize, katerega rezultati obrabe so bili nato povečani za faktor 100.000. Celotna numerična analiza je tako zajemala 30 simuliranih ciklov obrabe.

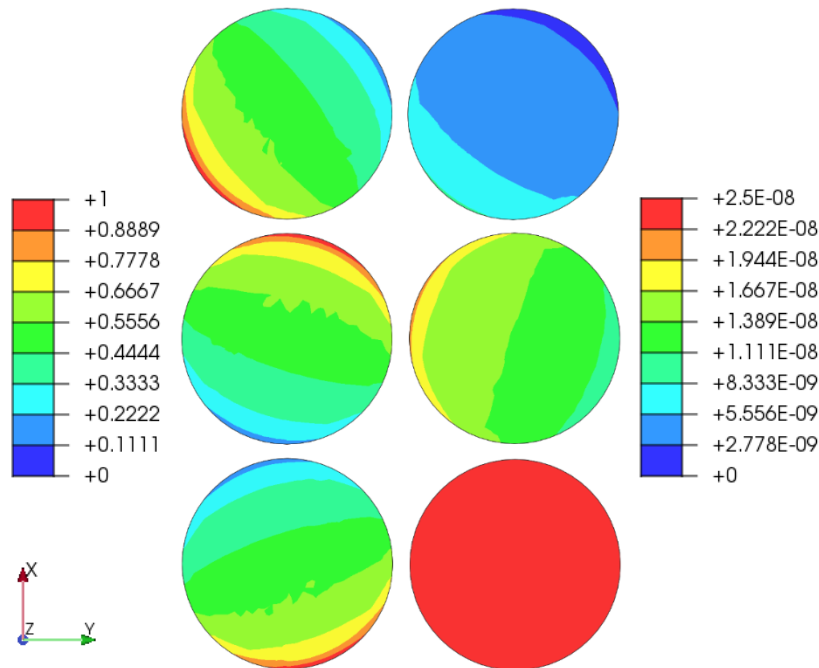


**Slika 4:** Uporabljena mreža končnih elementov za valjček in disk.

## 5 Rezultati

Za pravilno določitev obrabe je najpomembneje določiti pravilne kontaktne razmere na odvisni površini, kjer se računa obraba. Slika 5 v levem stolpcu prikazuje kontaktni tlak na spodnji površini valjčka v primeru nominalnega tlaka 0,5 MPa. Od zgoraj navzdol si sledijo rezultati za 2., 6. in 10. del premika diska v prvem ciklu obremenjevanja. Iz slike je razvidno, da je lokalno najvišji dosežen tlak enak 1 MPa. Pojavi se na tistem delu roba valjčka, kjer je smer hitrosti gibanja diska pravokotna na plašč valjčka. V smeri hitrosti nato tlak pada proti drugi strani kontaktne površine, kjer tlak doseže najnižjo vrednost. Polje kontaktnega tlaka je po velikosti in razporeditvi enako v vseh treh prirastkih, le zavrti se okrog osi valjčka. Enako polje kontaktnega tlaka se pojavi tudi pri ostalih delih premika diska, kar nakazuje, da je kontakt ustrezno obravnavan. Te ugotovitve veljajo tudi za preostale cikle in cikle pri obremenitvi z nominalnim tlakom 3,0 MPa.

Desni stolpec slike 5 prikazuje globino obrabe na spodnji površini valjčka v primeru nominalnega tlaka 0,5 MPa. Od zgoraj navzdol si sledijo rezultati za 2., 6. in 10. del premika diska v prvem ciklu obremenjevanja. Globina obrabe se izračuna za vsak del premika diska posebej ter se prišteje predhodno izračunani globini obrabe. Na sliki je tako razvidno naraščanje globine obrabe v skladu z vrtenjem polja kontaktnega tlaka, od katerega je obraba odvisna. V zadnjem delu premika diska je globina obrabe po celotni spodnji površini valjčka enaka in znaša  $2,5 \times 10^{-8}$  mm. V naslednjih ciklih se pojavi podoben vzorec naraščanja globine obrabe.

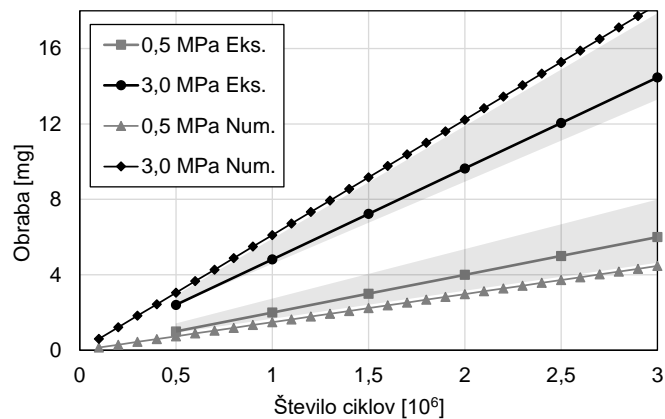


**Slika 5:** Polje kontaktnih tlakov v MPa (levi stolpec) in polje globine obrabe v mm (desni stolpec) za 2., 6. in 10. del premika diska (zaporedne vrstice) prvega cikla numerične analize pri nominalnem kontaktnem tlaku 0,5 MPa

Po koncu vsakega cikla je bila izračunana tudi sprememba prostornine valjčka zaradi obrabe, s pomočjo katere je bila izračunana hitrost obrabe. Numerično izračunana hitrost obrabe pri obremenitvi z nominalnim tlakom 0,5 MPa znaša  $1,49 \text{ mg}/10^6$  ciklov, pri nominalnem tlaku 3,0 MPa pa  $6,11 \text{ mg}/10^6$ . Odstopanje od eksperimentalno izmerjene hitrosti obrabe znaša 25,6 % pri nominalnem tlaku 0,5 MPa in 21,2 % pri nominalnem tlaku 3,0 MPa.

Potek obrabe v odvisnosti od števila ciklov prikazuje slika 6. Razvidno je, da numerično določena obraba linearno narašča z naraščanjem števila ciklov. Numerično izračunana obraba se v obeh primerih nahaja na skrajnem robu intervala raztrosa eksperimentalnih rezultatov (količnik  $k/H$  je bil izbran na podlagi najboljšega ujemanja z eksperimentalnimi rezultati) in uspe ujeti meje eksperimentalnih rezultatov. Ampak povečanje tlaka v numeričnem modelu ima večji vpliv na obrabo, kot v eksperimentu, kar nakazuje, da obraba v eksperimentu ni linearno odvisna od kontaktnega tlaka, kot predvideva vgrajeni model obrabe. Tako je, za doseganje natančnejših rezultatov obrabe s pomočjo numeričnega modela, vgrajeni model obrabe potrebno nadgraditi.

Kot je razvidno iz eksperimentalno izmerjene obrabe je njen potek prav tako linearen. Tako je mogoče sklepati, da je uporabljen linearen Archardov model obrabe ustrezen, vendar ga je potrebno nadgraditi z brez-dimenzijskim faktorjem obrabe, odvisnim od kontaktnega tlaka [11].



**Slika 6:** Primerjava obrabe med eksperimentom in numeričnimi analizami.

## 6 Zaključek

Predstavljen je Archradov model obrabe, vgrajen v programski paket PrePoMax, s katerim so bile izvedene numerične analize obrabe preizkušancev iz materiala UHMWPE. Numerične analize so bile pripravljene z enakimi pogoji kot eksperimentalno testiranje, kar je omogočilo neposredno primerjavo rezultatov. Primerjava rezultatov je pokazala, da numerični model dobro napove linearen potek obrabe preizkušancev, medtem ko znaša napaka v natančnosti rezultatov okrog 25 %. Za bolj natančne rezultate je potrebno uporabljen model obrabe nadgraditi z brezdimenzijskim faktorjem obrabe, odvisnim od kontaktnega tlaka.

## 7 Literatura

- [1] A. M. Alsamhan, *Rationale analysis of human artificial knee replacements*, J. King Saud Univ. - Eng. Sci., 25, 49–54, 2013.
- [2] J. F. Archard, W. Hirst, *The wear of metals under unlubricated conditions*, Proc. R. Soc. London. Ser. A. Math. Phys. Sci., 236, 1956.
- [3] M. Borovinšek, *PrePoMax*. <https://prepomax.fs.um.si/>
- [4] R. Crockett *et al.*, *Friction, lubrication, and polymer transfer between UHMWPE and CoCrMo hip-implant materials: a fluorescence microscopy study*, J. Biomed. Mater. Res. A, 89, 1011–1018, 2009.
- [5] G. Dhondt, *CalculiX*. <http://www.calculix.de/>
- [6] B. Innocenti, L. Labey, A. Kamali, W. Pascale, S. Pianigiani, *Development and Validation of a Wear Model to Predict Polyethylene Wear in a Total Knee Arthroplasty: A Finite Element Analysis*, Lubricants, 2, 193–205, 2014.
- [7] S. M. Kurtz, *The UHMWPE Handbook : Ultra-High Molecular Weight Polyethylene in Total Joint Replacement*, 2004.
- [8] T. De la Mora Ramírez *et al.*, *Numerical Model of Ultra-High Molecular Weight Polyethylene Abrasive Wear Tests*, Model. Numer. Simul. Mater. Sci., 10, 1–14, 2019.
- [9] B. Matej, Z. Ren, *PrePoMax - odprtokodni grafični vmesnik za izvajanje numeričnih analiz po metodi končnih elementov*, Kuhljevi dnevi 2021, 2021.
- [10] M. Nabrdalik, *Use of the Finite Element Method in the analysis of load of polyethylene*

- inserts of knee joint endoprosthesis*, J. Appl. Math. Comput. Mech., 13, 87–93, 2014.
- [11] V. Pakhaliuk, A. Polyakov, M. Kalinin, V. Kramar, *Improving the Finite Element Simulation of Wear of Total Hip Prosthesis' Spherical Joint with the Polymeric Component*, Procedia Eng., 100, 539–548, 2015.
- [12] S. Pal, H. Haider, P. J. Laz, L. A. Knight, P. J. Rullkoetter, *Probabilistic computational modeling of total knee replacement wear*, Wear, 264, 701–707, 2008.
- [13] V. Saikko, *Analysis of wear produced by a 100-station wear test device for UHMWPE with different contact pressures*, Tribol. Int., 171, 107560, 2022.
- [14] X. Shen, L. Cao, R. Li, *Numerical simulation of sliding wear based on Archard model*, 2010.
- [15] B. M. Wroblewski, *Wear of the high-density polyethylene socket in total hip arthroplasty and its role in endosteal captation*, Proc. Inst. Mech. Eng. Part H J. Eng. Med., 211, 109–118, 1997.
- [16] *MatWeb, Material property data*. <https://www.matweb.com/>



## *Vijačnica iz poliamida kot metamaterial z negativnim koeficientom linearne temperaturne razteznosti*

Miha Brojan<sup>1</sup> in Jan Zavodnik<sup>1</sup>

### *Polyamide helix as metamaterial with negative coefficient of linear thermal expansion*

**Povzetek.** V prispevku je predstavljen matematični model za opis termomehanskega odziva poliamidne niti, ki je zvita v vijačnico. V literaturi je bilo pokazano, da se takšna vijačnica zaradi izrazito anizotropnih termičnih lastnosti same niti, ki izhaja iz procesa njene izdelave, ob segrevanju znatno skrči (tudi do 50 %). Izpeljan matematični model upošteva transformacijo torzijskega zasuka niti v vijačnici v krčenje vijačnice, temperaturno odvisne anizotropne lastnosti, zaostale deformacije, ki nastanejo pri izdelavi vijačnice in nehomogeno polje deformacij v niti. Prikazani so tudi rezultati lastnih eksperimentov in primerjava z rezultati iz literature.

**Abstract.** This contribution presents a mathematical model for describing the thermomechanical response of a polyamide thread twisted and coiled into a helix. It has been shown in the literature that such a helix may contract significantly (up to 50 %) due to the highly anisotropic thermal properties of the thread, which results from the fabrication process. The derived mathematical model takes into account the transformation of the torsional twist of the thread in the helix into helix contraction, temperature-dependent anisotropic properties, residual strains that follow the fabrication of the helix and the inhomogeneous strain field in the thread. The results of our experiments and a comparison with the results from the literature are also presented.

## 1 Uvod

Poliamidna nit, ki je izdelana z ekstrudiranjem in vlečenjem, ima izrazito anizotropne termične lastnosti, saj ima zato polimerne verige v glavnem poravnane z vzdolžno osjo, s tem pa zelo visoko razmerje med koeficientoma linearne temperaturne razteznosti v radialni in vzdolžni smeri. To lastnost so za izdelavo metamateriala z učinkovito negativnim koeficientom temperaturne razteznosti prvi izkoristili Haines idr. [2], ki so pokazali, da se iz takšne niti zvita vijačnica

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo



pri segrevanju skrči tudi do 50 %. Doslej so ta pojav uporabili za izdelavo npr. aktuatorjev v mehki robotiki in aktivnih protez [8], komponent temperaturnih krmilnikov [7], pridobivanju mehanske energije iz odpadne toplote [4], itn.

Procesov izdelave vijajnic je več, npr. z navijanjem okrog droga ali prek vnašanja torzije in izgube stabilnosti pri nadkritični torziji. V zadnjem primeru, ki ga bomo tudi predstavili v tem delu, se ob istočasnem obremenjevanju z osno silo, v nad-kritičnem območju tvorijo navoji vijajnice, dokler ni izčrpana celotna ravna dolžina. Deformacijski mehanizem krčenja zaradi segrevanja tako pridobljene vijajnice temelji na spremembi torzije oz. zmanjšanju torzijskega zasuka, kar sledi iz dejstva, da je specifična deformacija znatno večja v radialni, kot v vzdolžni smeri. To spreminjaje lokalnega zasuka v efektivno krčenje omogoča, da vijajnica med segrevanjem opravlja mehansko delo.

V literaturi lahko zasledimo več različnih teoretičnih modelov, npr. [3, 5, 9], ki pa ne omogočajo najbolj natančne napovedi termomehanskega odziva takšne vijajnice. V tem prispevku bomo predstavili del modela, ki smo ga izpeljali na podlagi upoštevanja nelinearne zveze med torzijskim zasukom in temperaturnimi deformacijami, natančnega vpliva termične anizotropije, zaostalih deformacij, ki nastajajo pri izdelavi vijajnice in termično induciranim zmanjšanjem torzijskega zasuka. Prikazani so tudi rezultati (ne pa tudi izpeljava) modela, ki upošteva statistično porazdelitev navojev in s tem možnost mehkega prehoda do popolnega nasedanja navojev (brez zračnosti). Prikazan je način izdelave vijajnice, ki omenja toplotno obdelavo in urjenje vijajnice za zmanjšanje vpliva viskoznosti. Na koncu so podane tudi primerjave izpeljanega matematičnega modela in lastnih eksperimentov ter rezultatov iz dostopne literature.

## 2 Matematični model

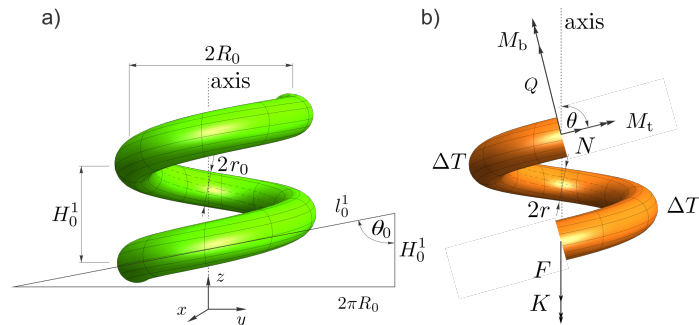
V tem poglavju je predstavljen matematični model termomehanskega odziva zvite poliamidne niti, ki ima negativen efektivni koeficient linearne toplotne razteznosti. Kot smo omenili že v uvodu, vijajno obliko pridobimo z nadkritično torzijsko deformacijo. V tem procesu se nit okroglega preseka najprej le torzijsko deformira, saj njena osrednja os pri vnašanju torzijske deformacije ostane ravna, pri izgubi stabilnosti, tj. prehodu v nadkritično območje, pa takšna struktura začne tvoriti obliko vijajnice. Enačbo vijajnice, parametrizirano vzdolž ločne dolžine  $s$ , zapišemo kot:  $(\mathbf{x}(s)) = (x(s), y(s), z(s)) = (R \cos 2\pi ns/l, R \sin 2\pi ns/l, s \cos \theta)$ , kjer je  $l$  ločna dolžina niti,  $R$  radij vijajnice,  $\theta$  njen kot in  $n$  število navojev vijajnice. Ker ima vijajnica konstantno upogibno in konstanto torzijsko ukrivljenost, ki nista enaki nič, lahko s pomočjo slike 1a) zapišemo

$$l = \sqrt{(2\pi nR)^2 + H^2} \quad \text{in} \quad \cos \theta = \frac{H}{l}, \quad (1)$$

kjer je  $H$  višina (dolžina) vijajnice z  $n$  navoji. Pri tem smo v zgornjem zapisu opustili indeks 0, ki označuje veličino iz začetne konfiguracije.

### 2.1 Vpliv mehanskih obremenitev

Mehanski obremenitvi na vijajnici sta sila  $F$  in moment  $K$ , ki delujeta v smeri vzdolžne osi vijajnice. Pri izpeljavi glavnih izrazov za opis termomehanskega odziva v vijajnico zvite poli-



**Slika 1:** a) Nedeformirana in b) deformirana konfiguracija vijačnice.

merne niti bomo uporabili predpostavke, da je le-ta:

- i) linearno elastična z upogibno  $EI$ , torzijsko  $GJ$ , osno  $EA$  in strižno togostjo  $\kappa GA$ , kjer sta  $E$ ,  $G$  Youngov in strižni modul,  $I$ ,  $J$  drugi in polarni moment prereza, ki ima ploščino  $A$ ;
- ii) v začetni (nedeformirani) konfiguraciji je napetostno stanje enako 0, vijačnica pa se zaradi mehanskih obremenitev in spremembe temperature deformira v drugo vijačnico;
- iii) na obeh koncih podprta tako, da je rotacija dokončno izdelane vijačnice onemogočena in da se število ovojev ohranja;
- iv) dovolj tanka, da je smiselno uporabiti Euler-Bernoulijeveo teorijo nosilcev, pri tem pa upoštevati, da so pomiki in zasuki lahko poljubno veliki;
- v) specifično deformacijo  $\boldsymbol{\epsilon}$  lahko aditivno razstavimo na del zaradi mehanskih obremenitev in dela zaradi temperature, tj.  $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\sigma}, T) = \boldsymbol{\epsilon}^{\text{el}}(\boldsymbol{\sigma}, T) + \boldsymbol{\epsilon}^T(T)$ , kjer je  $\boldsymbol{\epsilon}^{\text{el}}$  elastični del, ki je neposredno odvisen od napetosti in posredno od temperature, če se snovne lastnosti temperaturno odvisne in  $\boldsymbol{\epsilon}^T$  temperaturno inducirana specifična deformacija;
- vi) snovne lastnosti se v smeri polimernih verig približno ohranjajo.

Med izdelavo se v polimerno vlakno vnese precejšnja torzijska deformacija. Torzijski zasuk lahko izračunamo iz izraza  $\phi := \int_0^l \tau ds + \Gamma$ , ki upošteva tako torzijo vijačnice  $\tau$ , kot tudi zasuk  $\Gamma$ , ki je bil vnešen pri izdelavi. Poleg tega mehanske obremenitve in sprememba temperature povzročijo še deformacijo dobljene vijačnice, ki spremeni torzijo niti. Relacijo med spremembo torzijskega zasuka  $\Delta\phi$  in kotom vijačnice  $\theta$  lahko izračunamo s pomočjo znanega izraza iz diferencialne geometrije  $\tau = \|\partial^2 \mathbf{x} / \partial s^2\|^{-2} [\partial \mathbf{x} / \partial s, \partial^2 \mathbf{x} / \partial s^2, \partial^3 \mathbf{x} / \partial s^3]$ , kjer  $[\ , \ ]$  predstavlja mešani produkt,  $\mathbf{x}$  pa parametrizacijo vijačnice, ki smo jo navedli zgoraj. Od tod dobimo  $\tau = 2\pi n \cos \theta / l$ . Ker je v primeru vijačnice  $\tau = \text{konst.}$ , je skupni torzijski zasuk enak

$$\phi = \tau l + \Gamma = 2\pi n \cos \theta + \Gamma. \quad (2)$$

Od tod je možno opaziti, da je

$$\Delta\phi = 2\pi n (\cos \theta - \cos \theta_0), \quad (3)$$

pri čemer  $\Delta\phi := \phi - \phi_0$ , kjer spodnji indeks 0 označuje veličino iz začetne konfiguracije.

S pomočjo prve variacije  $\delta\Pi$  potencialne energije sistema  $\Pi = \mathcal{U} - \mathcal{W}$ , kjer je  $\mathcal{U}$  deformacijska energija in  $\mathcal{W}$  delo zunanjih obremenitev, določimo ravnovesne enačbe problema. Pri

tem upoštevamo, da je  $\mathcal{U} = \mathcal{U}^{el} + \mathcal{U}^T = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^{el} dV + \int_{\mathcal{B}} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}^T dV$  in  $\mathcal{W} = \mathcal{W}_F + \mathcal{W}_K = (\cos \theta - \cos \theta_0) l_0 F + K \varphi$ , kjer sta sila  $F$  in torzijski moment  $K$  zunanji mehanski obremenitvi. Pri tem smo zaradi znatno večje togosti polimerne niti v primerjavi s togostjo vijačnice pisali kar  $l \approx l_0$ . Iz dejstva, da je  $n = \text{konst.}$ ,  $\lambda_{ll} := l/l_0$  in slike 1 zapišemo  $R = \lambda_{ll} R_0 \sin \theta / \sin \theta_0$ , kjer je  $\lambda_{ll}$  razteg v smeri ločne koordinate niti. Končno lahko zapišemo relacijo med silo  $F$  in kotom vijačnice  $\theta$  v deformirani konfiguraciji kot

$$F(\theta) = (\cos \theta - \cos \theta_0) f(\theta)^{-1}, \quad (4)$$

pri čemer smo definirali pomožno funkcijo

$$f(\theta) := \frac{\cos^2 \theta}{EA} + \frac{\sin^2 \theta}{GA\kappa} + \frac{R_0^2 \cos^2 \theta \sin^2 \theta}{EI \sin^2 \theta_0} + \frac{R_0^2 \sin^4 \theta}{GJ \sin^2 \theta_0}. \quad (5)$$

V tem koraku smo zaradi enostavnosti zanemarili vpliv torzijskega momenta  $K$ , za katerega se izkaže, da ima znatno manjši vpliv kot  $F$  v primerih, ko se lahko vijačnica prosto deformira v vzdolžni smeri. Od tod z nekaj enostavnimi koraki izpeljemo izraz za spremembo dolžine vijačnice in njeno togost

$$\Delta H = l_0 F(\theta) f(\theta) \quad \text{in} \quad k = \frac{\Delta F}{\Delta H} = \frac{1}{l_0 f(\theta)}. \quad (6)$$

## 2.2 Vpliv temperaturnih obremenitev

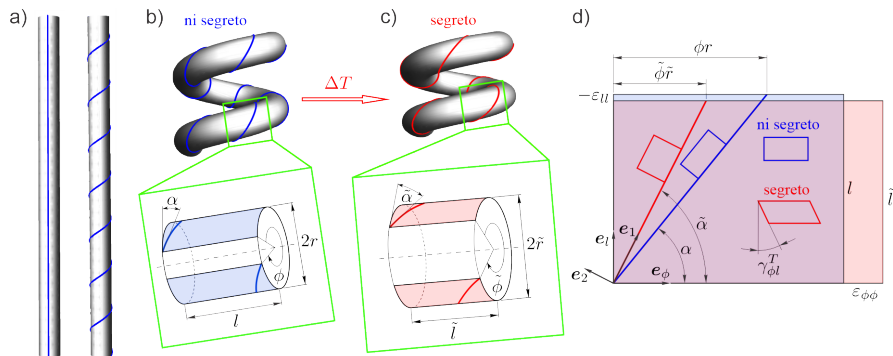
Glavni del deformacijskega mehanizma vijačno zvite poliamidne niti izhaja iz njenih snovnih lastnosti. Ker je poliamidna nit izdelana z ekstrudiranjem in vlečenjem, so polimerne verige v glavnem poravnane z vzdolžno osjo niti, zato ima nit zelo visoko razmerje med koeficientoma linearne temperaturne razteznosti v radialni in vzdolžni smeri [1, 2, 6]). Slika 2a)-c), ki prikazuje nedeformirano in deformirane konfiguracije niti in vijačnice pred in po segrevanju, prikazuje na zadnji ilustraciji d) specifično deformacijo segretega elementa in posledično zmanjšanje torzijskega zasuka zaradi znatno večje deformacije v radialni smeri. Pri tem se modri pravokotnik, ki je orientiran v smeri baznih vektorjev  $\boldsymbol{e}_\phi$  in  $\boldsymbol{e}_l$  deformira v rdeč paralelogram, kar nakazuje, da segrevanje povzroča specifične deformacije  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\phi\phi}^T, \boldsymbol{\varepsilon}_{ll}^T, \boldsymbol{\varepsilon}_{\phi l}^T \neq 0$ , oz.  $\boldsymbol{\varepsilon}_{11}^T, \boldsymbol{\varepsilon}_{22}^T \neq 0, \boldsymbol{\varepsilon}_{12}^T = 0$ , ki so zapisane v koordinatnem sistemu glavnih specifičnih deformacij.

Relacijo med strižnima napetostima dobimo s pomočjo rotacije koordinatnega sistema za kot  $\alpha$ , torej  $\gamma_{\phi l}^T = 2(\boldsymbol{\varepsilon}_{11}^T - \boldsymbol{\varepsilon}_{22}^T) \sin \alpha \cos \alpha$ , pri čemer je  $\gamma_{\phi l}^T := 2\boldsymbol{\varepsilon}_{\phi l}^T$  in  $\boldsymbol{\varepsilon}_{12}^T = 0$ . Od tod sledi  $\sin \alpha = l / \sqrt{l^2 + (\phi\rho)^2}$ ,  $\cos \alpha = \phi\rho / \sqrt{l^2 + (\phi\rho)^2}$  in  $\gamma_{\phi l}^T = 2\boldsymbol{\varepsilon}_{\phi l}^T l\rho / l^2 + (\phi\rho)^2$ , pri čemer smo definirali  $\boldsymbol{\varepsilon} := \boldsymbol{\varepsilon}_{11}^T - \boldsymbol{\varepsilon}_{22}^T$ . Kot smo omenili zgoraj, specifične (strižne) deformacije razstavimo na del zaradi mehanskih obremenitev in temperature,  $\gamma_{\phi l} = \gamma_{\phi l}^F + \gamma_{\phi l}^T$ , s čimer lahko sedaj zapišemo

$$\Delta\phi = \Delta\phi^F + \frac{2\boldsymbol{\varepsilon}\phi l^2}{l^2 + (\phi\rho)^2}. \quad (7)$$

S pomočjo linearizacije izraza dobimo

$$\phi(T) = \frac{1 + \gamma_{\phi,0}^T}{1 + \gamma_{\phi,0}^T - 2\boldsymbol{\varepsilon}(T)} (\Delta\phi^F + \phi_0), \quad (8)$$



**Slika 2:** a) Nedeformirana in torzijsko zvita nit v pod-kritičnem območju, tj. pred izgubo stabilnosti. b) V nad-kritičnem območju se nit začne po izgubi stabilnosti navijati v vijačnico. c) V vijačnico zvita nit se v segretem stanju deformira, pri čemer se dolžina vijačnice skrajša. d) Deformacija segretega elementa vijačnice.

kjer je  $\gamma_{l\phi,0} = \phi_0 \rho / l$ . Od tod in izraza (7) sledi

$$\Delta\phi(T) = \frac{2\varepsilon(T)}{1 + \gamma_{l\phi,0}^2 - 2\varepsilon(T)} \phi_0 + \frac{1 + \gamma_{l\phi,0}^2}{1 + \gamma_{l\phi,0}^2 - 2\varepsilon(T)} \Delta\phi^F \quad (9)$$

in izraz za efektivno specifično deformacijo vzdolž osi vijačnice

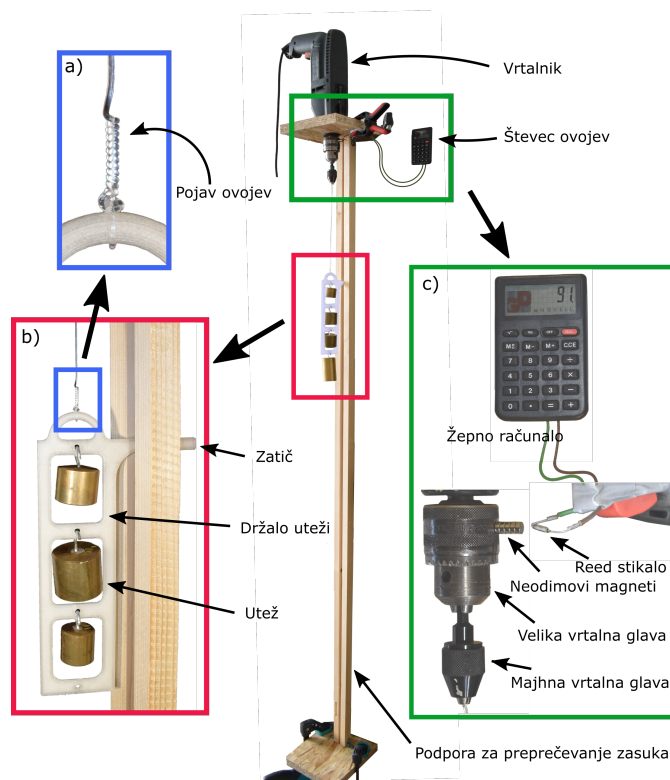
$$\varepsilon_{\text{eff}} = \lambda_{ll} \left( \frac{\Delta\phi(T)}{2\pi n \cos \theta_0} + 1 \right) - 1. \quad (10)$$

### 3 Eksperimenti in rezultati

V tem poglavju je najprej predstavljen proces izdelave vijačnice iz poliamidne niti, nato pa še praktični eksperimenti in primerjava z rezultati teoretičnega modela in rezultati iz literature.

Proces izdelave prikazuje slika 3. Osrednji del prikazuje navijanje poliamidne niti, ki je na enem koncu vpeta v ročni vrtalnik, na drugem koncu pa ima, kot prikazuje okvir b), preprečeno le rotacijo okrog svoje osi, obremenitev pa tako predstavlja torzijski moment in osna sila, ki jo povzročajo uteži. V nit se vnaša rotacija dokler se ta ne začne zvijati v vijačnico (okvir a) in se ne porabi celotna ravna dolžina. Pri tem moramo paziti, da je velikost osne sile ravno pravšnja, da se zaradi prevelike vrednosti nit ne pretrga ali zaradi premajhne ne začne vozlati. V okvirju c) je prikazan še preprost sistem merjenja števila obratov, ki vsebuje enostavno žepno računalno, magnet, ki je pritrjen na vpenjalno glavo vrtalnika in reed stikalo.

Tako izdelano vijačnico, v kateri so zaostale napetosti zaradi plastičnega preoblikovanja, odstranimo iz izdelovalnega sistema in jo obremenjeno z osno silo, npr. 3 N in jo približno 15 min segrevamo na 190 °C (še vedno pod temperaturo taljenja, ki je prbl. 220 °C). S tem pripravimo vijačnico da lažje ohranja svojo obliko, ker jo tako trajno deformiramo. Za zmanjšanje vpliva viskozne komponente v niti, vijačnico ciklično segrejemo in ohladimo pri obremenitvah z različnimi silami (od 8,5 do 16,5 N). Temu procesu pravimo urjenje. Vseskozi je na oba koncih vijačnice onemogočena rotacija. Vzporedno je potrebno na enak način pripraviti niti za določitev mehanskih lastnosti, ki so v splošnem odvisne od temperature. Za ta namen sta bila



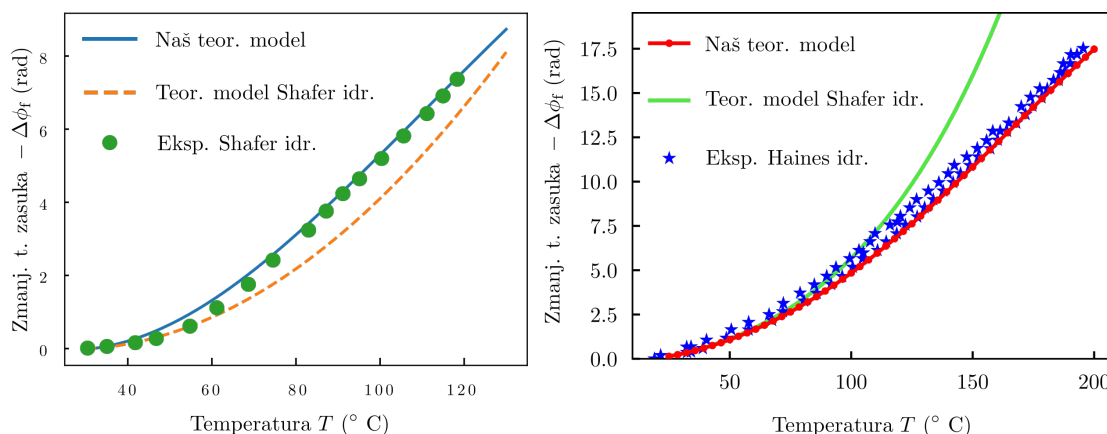
**Slika 3:** Sistem za izdelavo vijajčno zvite poliamidne niti. a) Razmere na spodnjem robu; b) Proces zvijanja v vijajčnico ob izgubi torzijske stabilnosti; c) Preprost sistem za merjenje števila obratov.

poleg običajnih preizkusov za določitev Youngovega in strižnega modula na trgalnem stroju Zwick Z050 in pripadajoči temperaturni komori, razvit še poseben preizkus s segrevanjem bakrenega valja in nanj navite niti za določitev koeficienta linearne temperaturne razteznosti v vzdolžni smeri niti. Izmerili smo naslednje snovne lastnosti, ki so podane v preglednici 1.

**Tabela 1:** Geometrijski in snovni parametri eksperimentalnih vzorcev.

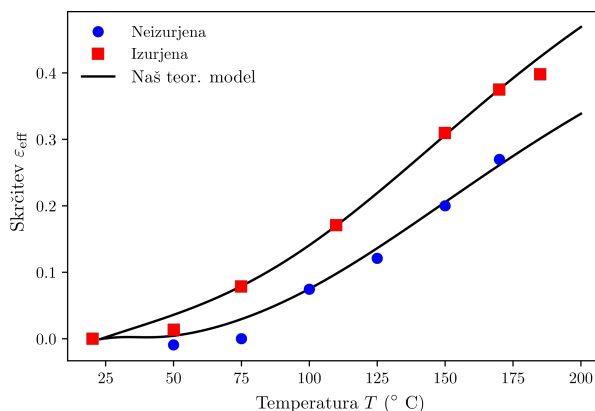
Vzorec	$m^{eq}$ (g)	$m$ (g)	$m_c^{eq}$ (g)	$H_0$ (mm)	$d_0$ (mm)	$\theta_0$ (°)	$N$ (l)	$\epsilon_{eff}^c$ (l)
neizurjen	300	300	850	201	1.25	73.6	102	0.30
izurjen	300	300	850	216	1.25	72	102	0.37
$E_{eff}^\infty$ (MPa)	6149		$E_{eff}^\infty$ (MPa)	3000		$\mathcal{T}$ (s)	39.97	
$\epsilon_{11}^T$ (l)	$\epsilon_{11}(T) = 1.094 \cdot 10^{-6}T^2 + 2.7172 \cdot 10^{-4}T$							
$\epsilon_{22}^T$ (l)	$\epsilon_{22}(T) = 2.209 \cdot 10^{-10}T^4 - 1.3169 \cdot 10^{-8}T^3 + 7.5841 \cdot 10^{-6}T^2 + 5.9866 \cdot 10^{-5}T$							

Primerjava rezultatov teoretičnega modela za spremembo torzijskega zasuka (9) in eksperimentov iz Ref. [6], ki so na sliki 4 upodobljeni s polno modro krivuljo in zelenimi pikami, kaže, da napovedni model temelji na ustreznih predpostavkah. Za primerjavo je prikazana še prekinjena oranžna krivulja, ki ponazarja teoretični model, predstavljen v [6]



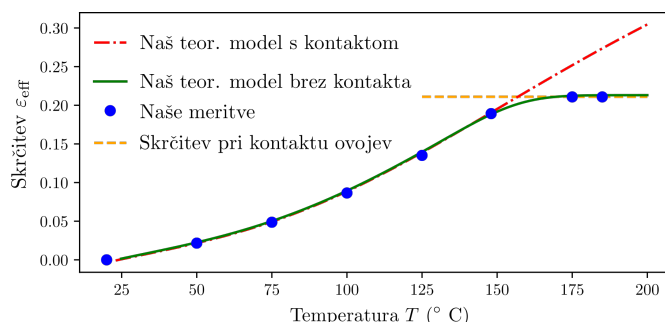
**Slika 4:** Sprememba torzijskega zasuka v vijajnici iz poliamidne niti v odvisnosti od temperature. Primerjava našega teoretičnega modela, rezultatov iz literature in napovednih modelov iz literature.

S pomočjo našega teoretičnega modela lahko relativno natančno napovemo tudi vzdolžno deformacijo vijajnice. Slika 5 prikazuje primerjavo rezultatov eksperimentov na vijajnici, ki je bila izpostavljena urjenju (rdeči kvadrati) in vijajnici, ki urjenju ni bila izpostavljena (modri krogi) ter napovedjo kontrakcije z izrazom (10). Tudi v tem primeru je razvidno dobro ujemanje med eksperimenti in teorijo. Zanimivo je videti tudi do kako velike razlike v odzivu obeh niti pride z urjenjem. Poleg tega izurjena vijajnica, za razliko od neizurjene, izkazuje zelo visoko stopnjo ponovljivosti (med 1. in 80. ciklom praktično nismo opazili razlike v mehanskem odzivu).



**Slika 5:** Razliko med rezultati eksperimentov na izurjeni in neizurjeni vijajnici prikazujejo rdeči kvadrati in modre pike. Rezultati napovednega modela so prikazani s polnima črnima krivuljama.

Čeprav v zgornjem poglavju nismo pokazali izpeljave dela teoretičnega modela, ki temelji na statistični analizi tvorjenja navojev vijajnice, na sliki 6 prikazujemo primer, v modelu dodan še pojav kontakta (nasedanja) posameznih navojev. S tem je možno opisati mehak prehod do polnega kontakta med navoji, in s tem prenehanjem krčenja.



**Slika 6:** Teoretična napoved temperaturne kontrakcije vijačnice in opis mehkega prehoda pri polnem nasedanju. Zelena polna krivulja prikazuje teoretično napoved, modre pike podatke iz eksperimentov, oranžna prekinjena črta mejno deformacijo, rdeča prekinjena črta pa teoretični model brez napovedi nasedanja.

#### 4 Zaključki

V prispevku je predstavljen matematični model za opis termomehanskega odziva poliamidne niti, ki je zvita v vijačnico. Model upošteva transformacijo torzijskega zasuka niti v vijačnici v krčenje vijačnice, temperaturno odvisne anizotropne lastnosti, zaostale deformacije, ki nastanejo pri izdelavi vijačnice in nehomogeno polje deformacij v niti. Na kratko je predstavljen proces izdelave s toplotno obdelavo in urjenjem vijačnice. Rezultati naših eksperimentov in eksperimentov iz literature kažejo, da je predstavljen matematični model zelo uspešen pri napovedi krčenja tako izdelane vijačnice pri segrevanju.

#### Literatura

- [1] C. L. Choy et al. Negative thermal expansion in oriented crystalline polymers. *Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition*, 19(2):335–352, 1981.
- [2] C. S. Haines et al. Artificial muscles from fishing line and sewing thread. *Science*, 343(6173):868–872, 2014.
- [3] F. Karami and Y. Tadesse. Modeling of twisted and coiled polymer muscle based on phenomenological approach. *Smart Mat. and Structures*, 26(12):125010, nov 2017.
- [4] S. Kim et al. Harvesting temperature fluctuations as electrical energy using torsional and tensile polymer muscles. *Energy Environ. Sci.*, 8, 11 2015.
- [5] C. Lamuta, S. Messelot, and S. Tawfick. Theory of the tensile actuation of fiber reinforced coiled muscles. *Smart Materials and Structures*, 27(5):055018, apr 2018.
- [6] M. W. Shafer et al. First steps in modeling thermal actuation of twisted polymer actuators using virgin material properties. In *Modeling, Simulation and Control*, vol. 2. ASME, 2016.
- [7] R. Wang et al. Torsional refrigeration by twisted, coiled, and supercoiled fibers. *Science*, 366(6462):216–221, 2019.
- [8] L. Wu, M. Jung de Andrade, R. S. Rome, C. Haines, M. D. Lima, R. H. Baughman, and Y. Tadesse. Nylon-muscle-actuated robotic finger. 9431:94310I, 2015.
- [9] Q. Yang and G. Li. A top-down multi-scale modeling for actuation response of polymeric artificial muscles. *JMPS*, 92:237–259, 2016.



## *Reološke in termične lastnosti poliizobutilena-PIB*

*Urška Gradišar Centa<sup>1</sup>, Aleš Kralj<sup>2</sup>, Miroslav Halilović<sup>1</sup>, Matjaž Žnidaršič<sup>2</sup> in Lidija Slemenik Perše<sup>1</sup>*

## *Rheological and thermal properties of polyisobutylene-PIB*

**Povzetek.** V prispevku je predstavljeno reološko vedenje dveh polimernih materialov poliizobutilena (PIB 1 in PIB 2) iz industrije izolacijskih stekel v širokem temperaturnem območju. S pomočjo diferenčne dinamične kalorimetrije je bila določena temperatura steklastega prehoda, ki je za PIB 1 znašala  $-65\text{ °C}$ , za PIB 2 pa  $-66.8\text{ °C}$ . Rezultati reoloških meritev so pokazali, da materiala izkazujeta viskoelastično vedenje tako v širokem frekvenčnem ( $0.01\text{--}100\text{ Hz}$ ), kot tudi v temperaturnem območju od  $-20\text{ °C}$  do  $60\text{ °C}$ . Pri temperaturah, višjih od  $60\text{ °C}$  materiala postaneta reološko-termodinamsko nestabilna, zato je pred uporabo potrebno doseči stabilizacijo. Termična analiza je pokazala, da je stabilizacija obeh PIB materialov dosežena s segrevanjem do temperature  $180\text{ °C}$ .

**Abstract.** In this paper, we present the rheological behaviour of two IGU industry polyisobutylene polymers (PIB 1 and PIB 2) over a wide temperature range. Differential dynamic calorimetry was used to determine the glass transition temperature which was for PIB 1 determined at  $-65\text{ °C}$  and  $-66.8\text{ °C}$  for PIB 2. The rheological tests showed that both materials exhibited viscoelastic behaviour in a wide frequency range ( $0.01\text{--}100\text{ Hz}$ ) as well as over a temperature range from  $-20\text{ °C}$  to  $60\text{ °C}$ . At higher temperatures, however, the materials became rheologically and thermodynamically unstable, therefore a stabilization of the material is necessary before the application. Thermal analysis showed that the stabilization of both PIB materials is achieved by heating the materials to a temperature of  $180\text{ °C}$ .

### **1 Uvod**

Poliizobutilen (PIB) je material, ki se na svetovni ravni uporablja na številnih industrijskih področjih, zaradi česar se je njegova poraba do leta 2017 povečala za kar 40 % [8]. Trenutno se tega materiala največ proizvede in porabi na območju Evrope, sledita ji Severna Amerika in Azijsko-Pacifiško področje [9]. Na svetovnem trgu predstavlja proizvodnja pnevmatik največje področje uporabe poliizobutilena, poleg tega pa se uporablja tudi za proizvodnjo maziv,

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

<sup>2</sup> Reflex Gornja Radgona d.o.o.



lepil, tesnil, kot dodatek za gorivo ter raztegljive folije. Silikonska guma je dobro tesnilo, vendar je zelo prepustna za vodno paro [4], medtem ko PIB ni idealno tesnilo, a ga v primerjavi s silikonsko gumo odlikuje kar 400 krat manjša vodoprepustnost [10]. Kombinacijo obeh materialov so že uporabili kot dvojno tesnilo pri izdelavi stavbnih izolacijskih stekel, a so v tem primeru zaznali defekte oziroma premike izven mesta prvotne lege poliizobutilena [7]. Edinstvena lastnost PIB-a, da je za plin edina neprepustna sintetična guma oziroma elastomer, ga postavlja na pomembno mesto pri uporabi v tesnilnih sistemih zastekljenih površin modernih stanovanjskih, trgovskih in poslovnih prostorov. V skladu s svetovnim trajnostnim razvojem oziroma kazalnikoma št. 11 in 13 (trajnostna mesta in skupnosti ter podnebni ukrepi) [5], je pomemben družbeni cilj minimiziranje porabe energije in posledično zmanjšanje ogljičnega odtisa ter doseganje vedno višje energetske učinkovitosti stavb. V ta namen se oblikujejo že več kot troslojne steklene izolacijske enote [1], za katere pa je za doseganje visoke kakovosti ključno učinkovito tesnenje na robovih [6].

Do nedavnega so se med stekla nameščali aluminijasti distančniki, preko katerih se je ustvarjal znaten toplotni most v robnem tesnilu, kar pa povzroča nastajanje notranjih napetosti in defektov v materialu ter posledično večje toplotne izgube. Zaradi tega kovinske distančnike nadomeščajo s polimernimi, s čimer se zmanjšajo inducirane napetosti znotraj tesnila, a mora biti tesnilo prav tako dolgoročno odporno na različne vremenske spremembe, kot so temperaturni gradient, vlaga in UV svetloba. Poliizobutilen ima nizko temperaturo steklastega prehoda ( $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), kar pomeni, da ostaja prožen material tudi pri nizkih temperaturah, ki jim je izpostavljen v zastekljenih izolacijskih enotah predvsem v zimskem času.

Poliizobutilen je kot primarno termoplastično tesnilo izpostavljeno fizikalnim (tlak, temperatura, vlažnost) in kemijskim spremembam, zaradi katerih se spremeni njegovo reološko in mehansko vedenje. Ena od ključnih lastnosti poliizobutilena, ki jih potrebujemo v omenjenih aplikacijah, je torej njegova termična stabilnost, saj je potrjen različnim okoljskim dejavnikom, ki lahko povzročijo njegovo degradacijo (razgradnjo).

## **2 Materiali in karakterizacijske metode**

Pri eksperimentu sta bila uporabljena dva komercialna poliizobutilena različnih proizvajalcev, ki sta v nadaljevanju označena s PIB 1 in PIB 2, katerih sestava in molekulska masa nista javno dostopna podatka.

Termične lastnosti vzorcev so bile analizirane z uporabo metode diferenčne dinamične kalorimetrije (DSC) na napravi DSC Q2500 (TA Instruments, USA) z avtomatsko menjavo vzorcev. Vzorci so bili ročno oblikovani v granulo primerne mase (7-9 mg) in hermetično zaprti v aluminijast lonček. Meritve so bile izvedene v inertni atmosferi s pretokom inertnega plina - dušika 50 ml/min. V meritvah je bilo zajeto temperaturno območje med  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$  in  $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ , hitrosti segrevanja in ohlajanja sta bili  $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ . Protokol meritve je bil sledeč: vzorec je bil najprej ohlajen na temperaturo  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ , na kateri smo ga zadrževali 5 minut, nato ga segreli do temperature  $100$  pri prvi analizi oziroma do  $200\text{ }^{\circ}\text{C}$  pri drugi ter ga tudi na najvišji temperaturi zadrževali 5 minut, sledilo je ohlajanje do temperature  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ , nato pa ponovno segrevanje pod enakimi pogoji. Za analizo termičnih prehodov je bil vselej uporabljen drugi cikel segrevanja ter računalniški program TRIOS.

Reološke meritve so bile opravljene v inertni dušikovi atmosferi z rotacijskim reometrom MCR 302 (Anton Paar) in senzorskim sistemom plošča-plošča s premerom 25 mm ter pri konstantni medploščni razdalji 1 mm (PP25/1 mm). Območje linearnega viskoelastičnega odziva je bilo določeno pri temperaturah  $60\text{ }^{\circ}\text{C}$  in  $180\text{ }^{\circ}\text{C}$  z amplitudnim testom v območju

strižnih napetosti  $\tau$  od 10 do 20 000 Pa pri temperaturi 60 °C ter od 10 do 3 000 Pa pri temperaturi 180 °C, v obeh primerih s konstantno frekvenco oscilacije 1 Hz.

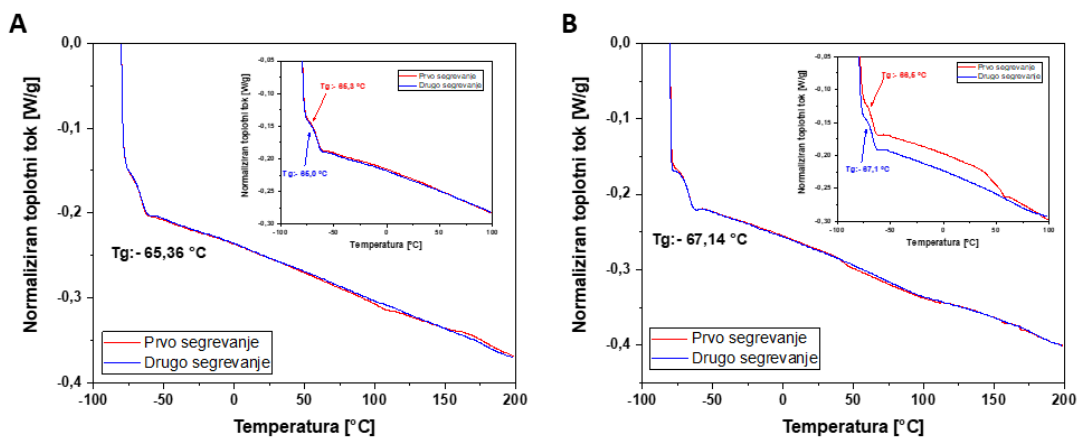
Za nadaljnjo frekvenčno in temperaturno odvisno reološko karakterizacijo materialov so bili izvedeni oscilacijski frekvenčni testi. Pri frekvenčnem testu smo spremljali odvisnost dinamičnih modulov  $G'$  in  $G''$  od frekvence v območju med 0,01 in 100 Hz pri stalni temperaturi 60 °C in konstantno strižno napetostjo v območju linearnega viskoelastičnega odziva. Pri temperaturnih testih smo pri konstantni frekvenci 1 Hz in strižni napetosti 1000 Pa spreminjali temperaturo s hitrostjo 3°/min v temperaturnem območju med -20 °C in 60 °C, pri čemer je bil vzorec razbremenjen (normalna sila je bila nastavljena na 0 N pri variabilni višini reže). Test reološke stabilnosti materiala je bil izveden pri temperaturi 60 °C, strižni napetosti  $\tau$  400 Pa ter frekvenci 1 Hz. Ciklična temperaturna testa z večkratnim segrevanjem in ohlajanjem istega vzorca pa sta bila narejena pri frekvenci 1 Hz ter strižni napetosti 200 Pa (PIB 1) in 250 Pa (PIB 2) v temperaturnem območju med 15 in 180 °C. Pri vseh meritvah je bil zunanji rob vzorca v senzorskem sistemu obdan s silikonskim oljem Sil 180, s čimer je bilo preprečeno izsuševanje vzorca in hlapljenje posameznih komponent vzorca med meritvijo.

### 3 Rezultati

#### 3.1 Termične lastnosti

Termogrami vzorcev, ki so bili rezultat dinamične diferenčne kalorimetrije (DSC) so prikazani na sliki 1. Neposredno izmerjen toplotni tok skozi vzorec glede na referenco je normaliziran z maso vzorca (ordinatna os na sliki 1 v enotah W/g), saj je nastali toplotni tok odvisen tako od hitrosti segrevanja in absolutne temperature kot tudi od mase in specifične toplote vzorca. Vidimo lahko, da sta oba vzorca izkazovala skoraj enako temperaturo steklastega prehoda, ki je za PIB 1 znašala -65,4 °C, za PIB 2 pa -67,1 °C. Vstavljena grafa na sliki 1A in 1B prikazujeta termograma obeh vzorcev, posnetih do nižje temperature, to je bilo do temperature 100 °C. Iz teh rezultatov je razvidno, da je v tem temperaturnem območju vzorec PIB 2 bolj nestabilen, saj je med prvim in drugim segrevanjem prišlo do znatne spremembe toplotnega toka skozi vzorec. Za razjasnitev termične stabilizacije materiala smo nato pripravili nova vzorca in termograma posneli do temperature 200 °C (slika 1A in 1B).

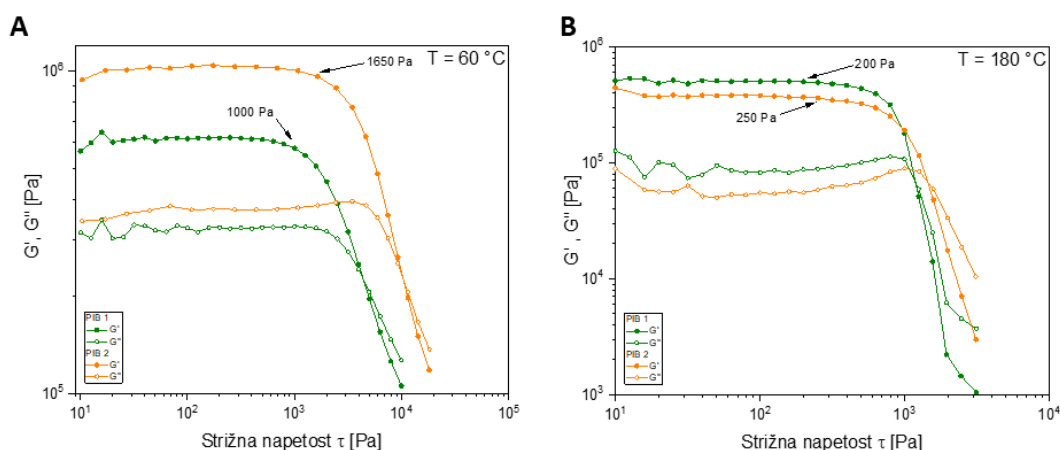
Toplotni tok skozi vzorec PIB 1 se tekom obeh segrevanj nekoliko razlikuje tudi pri temperaturah nad 100 °C, kar kaže na slabšo termično stabilnost vzorca, pri vzorcu PIB 2 pa sta obe krivulji v višjem temperaturnem območju enaki.



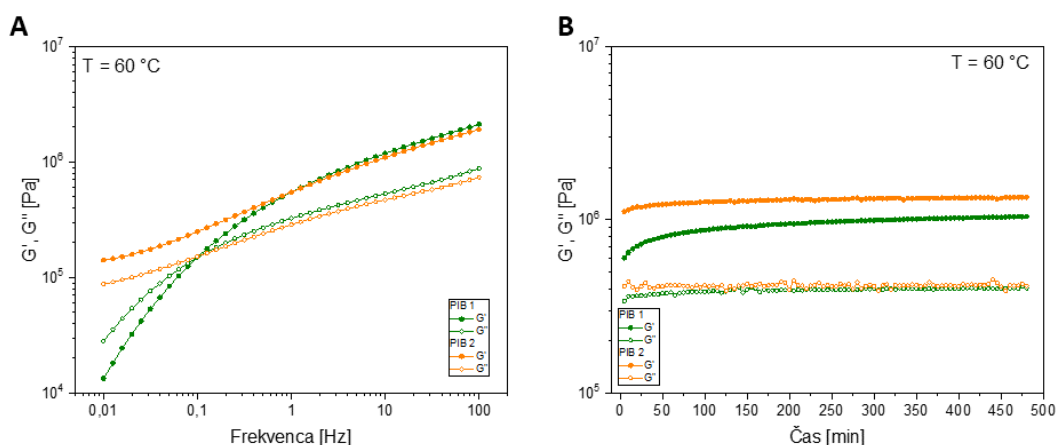
Slika 1: DSC termogrami A) PIB 1 do temperature 200 °C, B) PIB 2 do temperature 200 °C.

### 3.2 Reološke lastnosti

Amplitudna testa na obeh vzorcih smo izvedli pri temperaturah 60 °C (slika 2A) in 180 °C (slika 2B). Na podlagi teh meritev so bile določene najvišje vrednosti strižne napetosti v območju linearnega viskoelastičnega odziva (LVO) pri obeh temperaturah, ki sta pri 60 °C znašali 1000 Pa za PIB 1 in 1650 Pa za PIB 2; pri temperaturi 180 °C pa 200 Pa za PIB 1 in 250 Pa za PIB 2. Pri obeh temperaturah sta oba PIB polimera izkazovala točko izenačenja dinamičnih modulov, pri kateri pride do spremembe reološkega vedenja iz stabilne strukture trdnega telesa v strukturo tekočini podobnega materiala. Pri temperaturi 60 °C je PIB 1 izkazoval točko izenačenja modulov pri strižni napetosti 4382 Pa, PIB 2 pa pri 10332 Pa, medtem ko se je ta točka pri temperaturi 180 °C nahajala pri nižjih napetosti, in sicer 1191 Pa za PIB 1 in 1443 Pa za PIB 2.

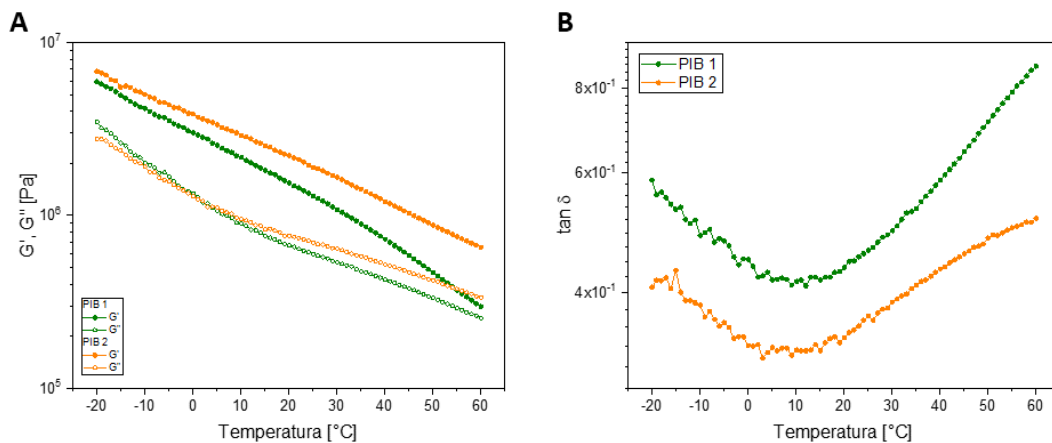


**Slika 2:** Elastični  $G'$  in viskozni  $G''$  modul kot funkciji strižne napetosti pri konstantni temperaturi A) 60 °C in B) 180 °C.



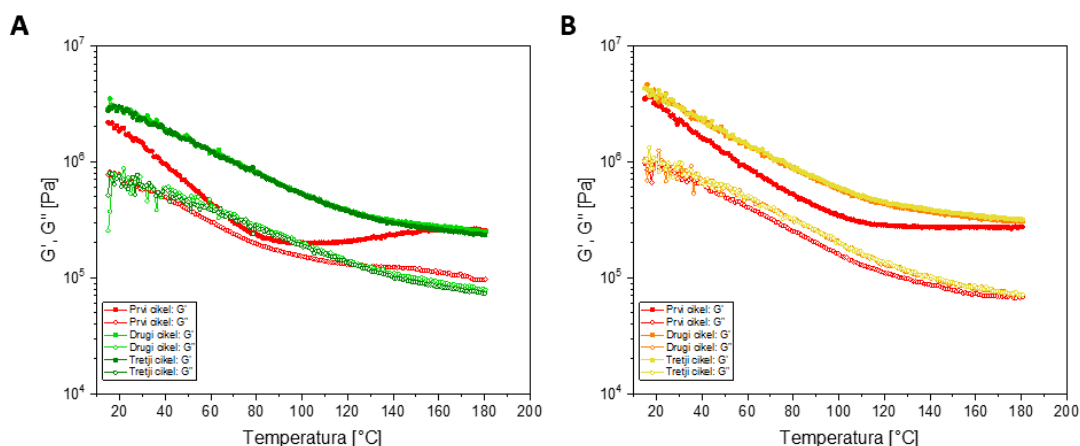
**Slika 3:** Elastični  $G'$  in viskozni  $G''$  modul kot funkciji a) frekvence pri temperaturi 60 °C, b) časa pri temperaturi 60 °C in strižni napetosti 400 Pa (test stabilnosti).

Viskoelastične lastnosti obeh proučevanih PIB materialov smo pri konstantni strižni napetosti 1000 Pa določali v frekvenčnem območju med 0.01 in 100 Hz (slika 3A). Pri vzorcu PIB 1 je elastični modul  $G'$  prevladoval nad viskozni modulom  $G''$  vse do frekvence 0,1 Hz, kjer opazimo točko izenačenja dinamičnih modulov. Pri nižjih frekvencah se elastični modul bolj izrazito zmanjša in prevladujoča komponenta postane viskozni modul  $G''$ , kar nakazuje na nestabilnost in tekočinski karakter materiala. Po drugi strani pa so rezultati pri PIB 2 pokazali prevladovanje elastičnega modula  $G'$  nad viskozni  $G''$  v celotnem proučevanem frekvenčnem območju. V tem primeru točka izenačenja na grafu ni prisotna, kar kaže na to, da je PIB 2 v tem območju frekvenc bolj stabilen od PIB 1, višje vrednosti elastičnega modula  $G'$  pri vzorcu PIB 2 pa nakazujejo na višjo stopnjo prepletenosti molekul. Na sliki 3B je prikazana časovna odvisnost elastičnega  $G'$  in viskoznega  $G''$  modula znotraj časovnega okvirja osmih ur pri konstantnih pogojih deformacije (strižna napetost 400 Pa, frekvenca 1 Hz, temperatura 60 °C). Razvidno je, da se viskoelastične lastnosti pri obeh PIB polimerih spreminjajo bolj izrazito v začetku meritve, vzorca pa preideta v ustaljeno stanje po približno 400 minutah.



**Slika 4:** A) Elastični  $G'$  in viskozni  $G''$  modul kot funkcija temperature do 60 °C, B) temperaturna odvisnost modula izgub ( $\tan \delta$ ).

Slika 4A prikazuje temperaturno odvisnost dinamičnih modulov  $G'$  in  $G''$  do temperature 60 °C. Iz rezultatov je razvidno, da je vzorec PIB 2 izkazoval višji elastični modul kot PIB 1 v celotnem temperaturnem območju, pri čemer je bila razlika bolj izrazita pri višjih temperaturah. Viskozna modula  $G''$  obeh polimerov sta bila do temperature 10 °C približno enaka, nato pa je bila višja vrednost določena za vzorec PIB 2. Na sliki 4B sta prikazana modula izgub v enakem temperaturnem območju, iz katerih je razvidno, da je višjo vrednost, torej večji vpliv viskoznega dela viskoelastičnega vedenja izkazoval PIB 1. Razlika je bila še posebej izrazita pri višjih temperaturah.



**Slika 5:** Elastični  $G'$  in viskozni  $G''$  modul kot funkciji temperature skozi pri treh ciklih segrevanja in ohlajanja: A) PIB 1, B) PIB 2.

Da bi proučili vpliv temperature na stabilnost viskoelastične strukture PIB polimerov, smo vzorce izpostavili več ciklom segrevanja in ohlajanja. Temperaturna odvisnost dinamičnih modulov  $G'$  in  $G''$  od sobne temperature do temperature 180 °C pri treh zaporednih ciklih segrevanja in ohlajanja je prikazana na sliki 5. Rdeči krivulji predstavljata dinamična modula  $G'$  in  $G''$  med prvim segrevanjem, medtem ko zelene in oranžno-rumene krivulje predstavljajo rezultate drugega oziroma tretjega segrevanja. Vzorec PIB 1 je pri prvem segrevanju izkazoval zmanjševanje dinamičnih modulov z naraščajočo temperaturo, pri čemer je elastični modul pri temperaturah okoli 100 °C izkazoval najnižje vrednosti, ki so nato z nadaljnjim naraščanjem temperature začele naraščati (slika 5A). Pri drugem in tretjem segrevanju vzorca so bile vrednosti elastičnega modula  $G'$  identične v celotnem temperaturnem območju, kar nakazuje, da se je material v prvem ciklu termično stabiliziral. To dodatno potrjujejo rezultati v območju nad temperaturo 160 °C, kjer so bile vrednosti elastičnega modula  $G'$  praktično enake in neodvisne od števila cikla. Iz dobljenih rezultatov lahko sklepamo, da je za termično stabilizacijo vzorec PIB 1 potrebno pregreti vsaj na 160 °C. Pri vzorcu PIB 2 opazimo podobno vedenje; elastični modul  $G'$  pada do temperature 120 °C, nato pa se njegove vrednosti ustalijo. Opazimo pa lahko, da je razlika med krivuljo pri prvem segrevanju in naslednjih dveh segrevanjih bistveno manjša pri vzorcu PIB 2 kot pri PIB 1, kar nakazuje, da je vzorec PIB 2 izkazoval večjo stabilnost.

Pri prvem segrevanju se reološko vedenje obeh vzorcev sklada z vedenjem delno kristalnih polimerov. Med segrevanjem sta bila vzorca poliizobutilena podvržena degradaciji bodisi zaradi temperature ali mehanske obremenitve (oksidacijo smo izključili zaradi opravljanja meritev v inertni atmosferi). Omenjen proces pa ustvarja strukturne spremembe v vzorcu, kar se odraža v zniževanju povprečne molekulske mase PIB-a [2], iz česar izhaja tudi razlika v reološkem vedenju med prvim in nadaljnjimi segrevanji. Po degradaciji se krajše polimerne verige začnejo kemijsko prepletati s kovalentnimi vezmi, tako da se pri prvem segrevanju do temperature 180 °C material dokončno zamreži, ter v nadaljevanju ohranja svoje stabilno reološko vedenje.

## 4 Zaključki

Raziskava se je osredotočala na vprašanje ali sta polizobutilena (PIB 1 in PIB 2) reološko in termodinamsko stabilna materiala oziroma na kakšen način je mogoče doseči njuno stabilizacijo. Termogrami kažejo, da se temperatura steklastega prehoda obeh vzorcev bistveno ne razlikuje, pri vzorcu PIB 2 opazimo večjo spremembo toplotnega toka skozi vzorec med prvim in drugim segrevanjem, kar bi lahko pomenilo, da vsebuje večji delež komponente z nižjo molekularno maso.

V literaturi navajajo, da naj bi bila temperatura pri nanosu poliizobutilenske tesnilne mase približno 180 °C [3], kar kaže na to, da je potrebno ta material najprej termično obdelati, s čimer dosežemo stabilizacijo materiala pred aplikacijo oziroma desorpcijo plinov s površine za zagotavljanje boljšega oprijema na substrat. Rezultati predstavljene raziskave so pokazali, da po 5 minutni izpostavitvi PIB materiala temperaturi 180 °C le-ta postane reološko in termično stabilen, s čimer ga lahko uvrstimo v skupino termo-reološko enostavnih elastomerov.

## 5 Zahvala

Raziskavo je finančno podprla Javna agencija za raziskovalno dejavnost (ARRS) v okviru projekta št. L2-3172 in programa P2-0264.

## 6 Literatura

- [1] A. Kralj, M. Drev, M. Žnidaršič, B. Černe, J. Hafner, B. P. Jelle, *Investigations of 6-pane glazing: Properties and possibilities*, Energy and Buildings, 190, 61-68, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2019.02.033>
- [2] A. L. Iordanskii, S. V. Fomin, A. A. Burkov, Yu. N. Pankova, G.E. Zaikov, *Characterization of the structure and properties of the polymer blends based on poly-3-hydroxybutyrate and polyisobutylene*, Journal of Characterization and Development of Novel Materials, 7 (2), 2015
- [3] A.V. Pocius, 8.12 - *Adhesives and Sealants*, Polymer Science: A Comprehensive Reference, 305, 2012
- [4] E. L. Cussler, G. D. Moggridge, *Chemical Product Design*, Cambridge Series in Chemical Engineering, Cambridge University Press, Cambridge, 2001
- [5] <https://sdgs.un.org/goals>
- [6] J. Klosowski, A.T. Wolf, *Sealants in Construction*, 2nd ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 2016
- [7] M. Cwyl, R. Michalczyk, S. Wierzbicki, *Polyisobutylene and Silicone in Warm Edge Glazing Systems—Evaluation of Long-Term Performance*, Materials, 14, 3594, 2021. <https://doi.org/10.3390/ma14133594>
- [8] Merchant Research and Consulting Ltd Polyisobutylene: 2012 World Market and Forecast up to 2017, Merchant Research and Consulting Ltd, 2012
- [9] Polyisobutylene: 2022 World Market Outlook and Forecast up to 2031, 2022
- [10] P. Thorlaksen J. Abildskov, G. M. Kontogeorgis, *Prediction of gas solubilities in elastomeric polymers for the design of thermopane windows*, Fluid Phase Equilibria, 211(1), 17-33, 2003, [https://doi.org/10.1016/S0378-3812\(03\)00113-4](https://doi.org/10.1016/S0378-3812(03)00113-4)



## *Modeling strain softening in spatial frames using velocity-based formulation*

Sudhanva Kusuma Chandrashekhara<sup>1</sup>, Dejan Zupan<sup>1</sup>

## *Modeliranje mehčanja materiala v prostorskih okvirjih z uporabo formulacije, osnovane na hitrostih*

**Abstract.** Modelling complex mechanical behaviour of structures is usually reflected in sensitive behaviour of numerical solution methods and represents a significant challenge for numerical modelling. In the present work, we address the problem of strain softening which is often observed in porous heterogeneous materials in combination with non-linear response of spatial frames. In our analysis we will focus on beam-like structural elements with proper consideration of non-linear geometry and material non-linearity including the softening regime. The proposed approach is based on velocity-based beam formulation with energy preservation. The computational advantages of the formulation are preserved after the efficient detection of cross-sectional singularity and post-critical treatment of localized strains are implemented into the formulation. The efficiency, accuracy, and robustness of the proposed method are demonstrated by numerical example.

**Povzetek.** Modeliranje zahtevnejšega obnašanja konstrukcij je pogosto povezano z večjimi izzivi in računskimi težavami pri numeričnem reševanju. V članku predstavljamo računski postopek za reševanje problemov z upoštevanjem pojava mehčanja, ki je značilno za porozne materiale ob doseženih kritičnih pogojih v nelinearnem območju konstrukcije. Osredotočimo se na linijske konstrukcijske modele z upoštevanjem geometrijskih in materialnih nelinearnosti, kjer zajamemo tudi območje mehčanja materiala. Predstavljeni pristop temelji na končnih elementih z interpolacijo hitrosti in ohranjanjem energije. Prednosti in učinkovitost pristopa se ohrani zaradi implementacije učinkovitega algoritma za določitev singularnosti v prerezu in post-kritične analize po lokalizaciji. Učinkovitost, natančnost in robustnost predlagane metode demonstriramo z računskim primerom.

## 1 Introduction

Computational modelling for predicting the complex mechanical response of slender structures has received enormous attention due to its vast amount of application in diverse engineering

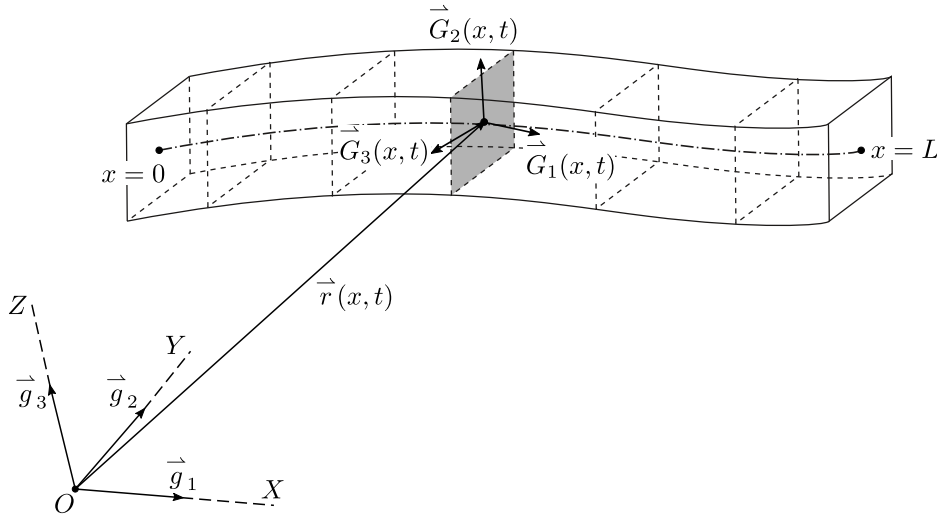
---

<sup>1</sup> University of Ljubljana, Faculty of Civil and Geodetic Engineering

fields. Since many of the contemporary applications are characterized by geometrically complex embeddings of arbitrarily oriented slender rods and beams, the models predicting the response of complex structures with realistic constitutive behaviour and describing the phenomena such as plasticity, softening, crack propagation etc., introduce additional complexities into the model. Such demanding problems require stable and robust formulations together with reliable solution methods that are efficient and accurate.

The present work focuses on strain localization, a phenomena often encountered when a stress dependent critical condition is reached at some material point of the solid body. The onset of critical condition results in a thin band of localized region with discontinuities in strain / displacement fields which further accelerates damaging of the material. Although the problem is theoretically demanding, it has a large practical importance and has motivated several researchers to look for stable, reliable and computationally efficient solution methods. This work is an extension of [3], where we presented the implementation of path-following constraint for the velocity based formulation of geometrically exact beams for the post-critical analysis. In this paper, we focus on nonlinear material constitutive laws and the evaluation of stress resultant forces and moments and the cross-sectional tangent stiffness matrix. We demonstrate the ability to efficiently solve the phenomenon of strain softening and localization with a simple numerical example.

## 2 Equations of Cosserat beam model



**Figure 1:** Configuration of a three dimensional beam at an arbitrary time  $t$ .

The geometry of a three-dimensional beam is represented by a line of centroids and a family of cross sections, see Figure 1. The model is often attributed to Reissner and Simo [5] and is called the geometrically exact beam model. The line of centroids is a spatial curve at an arbitrary time  $t \geq 0$  defined by a position vector  $\vec{r}(x, t)$  and parametrized by an arc-length parameter  $x \in [0, L]$



at any fixed time  $t$ . Two orthogonal reference frames are introduced for the description of the equations for the beam: (i) a fixed orthogonal basis represented by  $\{\vec{g}_1, \vec{g}_2, \vec{g}_3\}$  at the reference point  $O$  and (ii) local orthogonal base vectors  $\{\vec{G}_1, \vec{G}_2, \vec{G}_3\}$ . A transformation from the local basis to the fixed one is defined by a quaternion multiplication which is read as:

$$\vec{G}_i(x, t) = \hat{q}(x, t) \circ \vec{g}_i \circ \hat{q}^*(x, t) \quad (1)$$

where  $\hat{q}$  is a rotational quaternion,  $\hat{q}^*$  is its conjugate, and  $(\circ)$  denotes the quaternion product. The set of quaternions  $\mathbf{H}$  is a four dimensional Euclidean space where a quaternion can be described as a sum of a scalar and a vector.  $\hat{x} = s + \vec{v} = (s, \vec{v})$ ,  $s \in \mathbf{R}$ ,  $\vec{v} \in \mathbf{R}^3$  and the product of two quaternions  $\hat{x} = (s, \vec{v})$  and  $\hat{y} = (c, \vec{w})$  is defined as:

$$\hat{x} \circ \hat{y} = (sc - \vec{v} \cdot \vec{w}) + (c\vec{v} + s\vec{w} + \vec{v} \times \vec{w}) \quad (2)$$

where  $(\cdot)$  and  $(\times)$  denote scalar and vector product in  $\mathbf{R}^3$ . A quaternion with a unit norm ( $\|\hat{q}\| = 1$ ) defines the rotation which can be described in polar form as,

$$\hat{q} = \cos\left(\frac{\|\theta\|}{2}\right) + \sin\left(\frac{\|\theta\|}{2}\right) \vec{n}, \quad (3)$$

where,  $\|\theta\|$  is the angle of rotation and  $\vec{n} = \frac{\theta}{\|\theta\|}$  denotes the unit vector on the axis of rotation.

## 2.1 Discretized equation of motion

The system of governing equations for the Cosserat beam is a set of nonlinear partial differential equations which needs to be discretized in time and space. The time discretization is in accordance with the implicit midpoint rule and the spatial discretization is based on the standard Galerkin finite element method. For the sake of brevity, we here present only the final discretized equation of motion. For a given external distributed force and moment  $\tilde{\mathbf{n}}, \tilde{\mathbf{m}}$ , the linear and angular momentum balance equations are,

$$\begin{aligned} & \int_0^L \left[ \frac{\rho A}{h} (\mathbf{v}^{[n+1]} - \mathbf{v}^{[n]}) P_i + \mathbf{n}^{[n+1/2]} P_i' - \tilde{\mathbf{n}}^{[n+1/2]} P_i \right] dx - \lambda^{[n+1/2]} \mathbf{f}_e = \mathbf{0} \quad (4) \\ & \int_0^L \left[ \frac{\mathbf{J} \rho}{h} (\boldsymbol{\Omega}^{[n+1]} - \boldsymbol{\Omega}^{[n]}) P_i + \boldsymbol{\Omega}^{[n+1/2]} \times \mathbf{J}_\rho \boldsymbol{\Omega}^{[n+1/2]} P_i - \mathbf{K}^{[n+1/2]} \times \mathbf{M}^{[n+1/2]} P_i + \mathbf{M}^{[n+1/2]} P_i' - \right. \\ & \left. P_i (\boldsymbol{\Gamma}^{[n+1/2]} - \boldsymbol{\Gamma}_0) \times \mathbf{N}^{[n+1/2]} - (\hat{\mathbf{q}}^{*[n+1/2]} \circ \tilde{\mathbf{m}}^{[n+1/2]} \circ \hat{\mathbf{q}}^{[n+1/2]}) P_i \right] dx - \lambda^{[n+1/2]} \mathbf{M}_e = \mathbf{0}, \quad (5) \end{aligned}$$

where  $\lambda^{[n+1/2]} = \frac{\lambda^{[n+1]} + \lambda^{[n]}}{2}$  is the load factor at mid time,  $\mathbf{f}_e$  and  $\mathbf{M}_e$  are the vector of external point forces and moments respectively,  $h = t_{n+1} - t_n$  is the step size. The interpolated variables are the velocities and angular velocities at mid time  $(\mathbf{v}^{[n+1/2]}, \boldsymbol{\Omega}^{[n+1/2]})$  and are interpolated through  $p$  discrete points. The interpolation points,  $x_i$ ;  $i = 1, 2, 3, \dots, p$  are chosen equidistantly

on the interval  $[0, L]$  with  $x_0 = 0$  and  $x_p = N$ . We exploit the additive nature of the components of angular velocities in local frame and thus the standard interpolation functions in Euclidean vector spaces can be used without any inconsistencies. This results in simpler, more efficient, and robust formulation. Due to our choice of primary variables, it is convenient to express the angular momentum balance equation in local basis as well. For more detailed description of velocity-based formulation of Cosserat beams, the reader is referred to [6]. The time dependent load factor  $\lambda$  is defined using the differential form of arc-length constraint as presented in next section.

### 3 Arc-length method

In the investigation of stability analysis, various load-displacement control strategies have been proposed by numerous authors and among them, arc-length methods seem to be prevailing in tracing the load-displacement responses. With the onset of softening, the stress resultant forces and moments are reduced in the post-critical load levels. Hence the objective is to trace equilibrium states in pre- and post-critical load levels. Thus, the applied load is expressed as a function of a unique load parameter and the above equilibrium equations (4) and (5) can be expressed in the following compact form:

$$\mathbf{R} \left( \mathbf{W}^{[n+1/2]}, \lambda^{[n+1/2]} \right) = \mathbf{F} \left( \mathbf{W}^{[n+1/2]} \right) - \lambda^{[n+1/2]} \mathbf{P}_e = \mathbf{0}, \quad (6)$$

where  $\mathbf{W}^{[n+1/2]} = [\mathbf{v}^{[n+1/2]}, \boldsymbol{\Omega}^{[n+1/2]}]^T$  is the vector of average velocities and angular velocities at mid time  $t_{n+1/2}$ ,  $\mathbf{R}$  is the column of equilibrium equations,  $\mathbf{F}$  is the vector of internal forces and moments,  $\mathbf{P}_e = [\mathbf{f}_e, \mathbf{M}_e]^T$  is the vector of external reference point loads. With the introduction of an additional quantity  $\lambda^{[n+1/2]}$ , we now have  $m + 1$  unknowns,  $m$ -dimensional vector  $\mathbf{W}^{[n+1/2]}$  and the load factor  $\lambda^{[n+1]}$ . The time dependent load-displacement response of the structure can be represented using a tangent vector,  $\mathbf{y} = [\dot{\mathbf{r}}, \dot{\lambda}]^T$ . The path following constraint equation relating the unknowns is given by a generalized form of arc-length control [2]:

$$\xi \left( \dot{\mathbf{r}}, \dot{\lambda} \right) = \dot{\mathbf{r}}^T \mathcal{D} \dot{\mathbf{r}} + \dot{\lambda}^2 \mathbf{P}_e^T \mathcal{H} \mathbf{P}_e - 1 = 0. \quad (7)$$

From the perspective of velocity based approach, it is more convenient to use the following modified constraint equation discretized in time:

$$\xi \left( \mathbf{W}^{[n+1/2]}, \lambda^{[n+1]} \right) = h^2 \mathbf{W}^{[n+1/2]T} \mathcal{D} \mathbf{W}^{[n+1/2]} + \left( \lambda^{[n+1]} - \lambda^{[n]} \right)^2 \mathbf{P}_e^T \mathcal{H} \mathbf{P}_e - h^2 = 0, \quad (8)$$

where  $\mathcal{D}$  and  $\mathcal{H}$  are arbitrary symmetric scaling matrices. The extended system of equations and the Jacobian matrix can be easily formulated after linearizing equations (6) and (8). The details can be found in [3].

### 4 Integration of stress field and tangent modulus

In spatial beams, we often assume the Bernoulli's hypothesis of rigid cross-section, where the cross-sections suffers only rigid rotations while undergoing deformations which implies linear

distribution of longitudinal strain over the cross-section in the plane  $(y, z)$ ,

$$\boldsymbol{\varepsilon}(y, z) = \Gamma_1 + yK_3 + zK_2. \quad (9)$$

Furthermore, we assume that the longitudinal stress in the material fibre  $(y, z)$  is given by a nonlinear function of the longitudinal strain:

$$\boldsymbol{\sigma}(y, z) = \mathcal{F}(\boldsymbol{\varepsilon}(y, z)). \quad (10)$$

The stress resultant forces and moments are then obtained by the integration of the stress field over the cross-section  $A$ :

$$\begin{bmatrix} N_1^C \\ M_2^C \\ M_3^C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \iint \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) dy dz \\ \iint z\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) dy dz \\ \iint y\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) dy dz \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Assuming that the localization of deformation is primarily driven by longitudinal stresses, the shear resultants  $N_2^C$  and  $N_3^C$  and torsional moment  $M_1^C$  are assumed to linearly depend on shear  $(\Gamma_2, \Gamma_3)$  and torsional strains  $(K_1)$ :

$$\begin{bmatrix} N_2^C \\ N_3^C \\ M_1^C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} GA_2\Gamma_2 \\ GA_3\Gamma_3 \\ GJ_tK_1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

where  $G$  is the shear modulus,  $A_2$  and  $A_3$  are effective shear areas and  $J_t$  is the torsional moment of inertia. The assumptions are still valid for several type of structures like reinforced concrete frames. The components of the constitutive tangent matrix are given by partial derivatives of the stress resultants with respect to the axial strain and the curvatures:

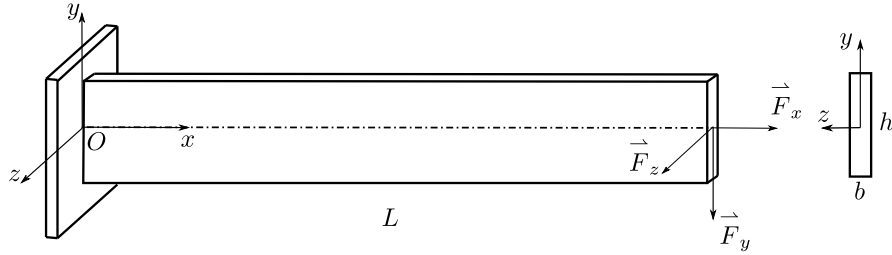
$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial \Gamma_1} \\ \frac{\partial N_1}{\partial K_2} = \frac{\partial M_2}{\partial \Gamma_1} \\ \frac{\partial N_1}{\partial K_3} = \frac{\partial M_3}{\partial \Gamma_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \iint \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} dy dz \\ \iint z \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} dy dz \\ \iint y \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} dy dz \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \frac{\partial M_2}{\partial K_2} \\ \frac{\partial M_2}{\partial K_3} = \frac{\partial M_3}{\partial K_2} \\ \frac{\partial M_3}{\partial K_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \iint z^2 \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} dy dz \\ \iint yz \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} dy dz \\ \iint y^2 \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{d\boldsymbol{\varepsilon}} dy dz \end{bmatrix}. \quad (13)$$

For the sake of simplicity, we evaluate the integrals in equations (11) and (13) numerically using two dimensional Gaussian integration.

## 5 Numerical example

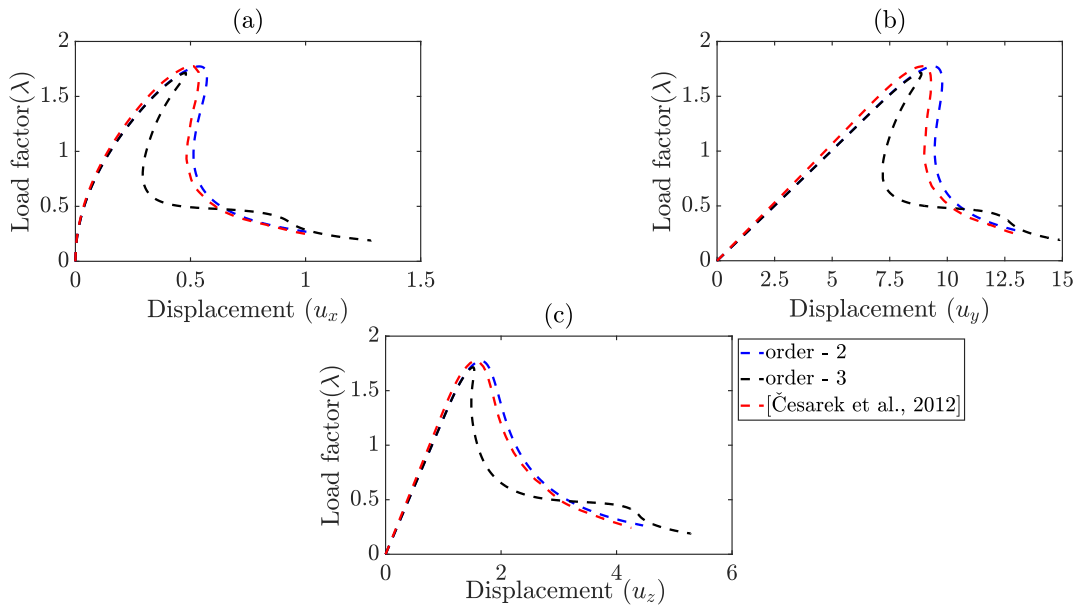
In this example we demonstrate spatial bending of a hyper-elastic cantilever beam with softening behaviour. The cantilever beam is of initial length  $L = 100$  and a rectangular cross-section  $(b = 2, h = 5)$  as shown in Figure 2. A hyper-elastic material with softening is assumed according to the following bi-linear stress-strain law [1, 4]:

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \begin{cases} \frac{\sigma_y}{\varepsilon_y} \boldsymbol{\varepsilon}, & 0 \leq |\boldsymbol{\varepsilon}| \leq \varepsilon_y \text{ (hardening)} \\ \frac{\sigma_y}{\varepsilon_u - \varepsilon_y} (\varepsilon_u - \boldsymbol{\varepsilon}) \text{sign}(\boldsymbol{\varepsilon}), & \varepsilon_y < |\boldsymbol{\varepsilon}| < \varepsilon_u \text{ (softening)} \\ 0, & |\boldsymbol{\varepsilon}| \geq \varepsilon_u \end{cases} \quad (14)$$

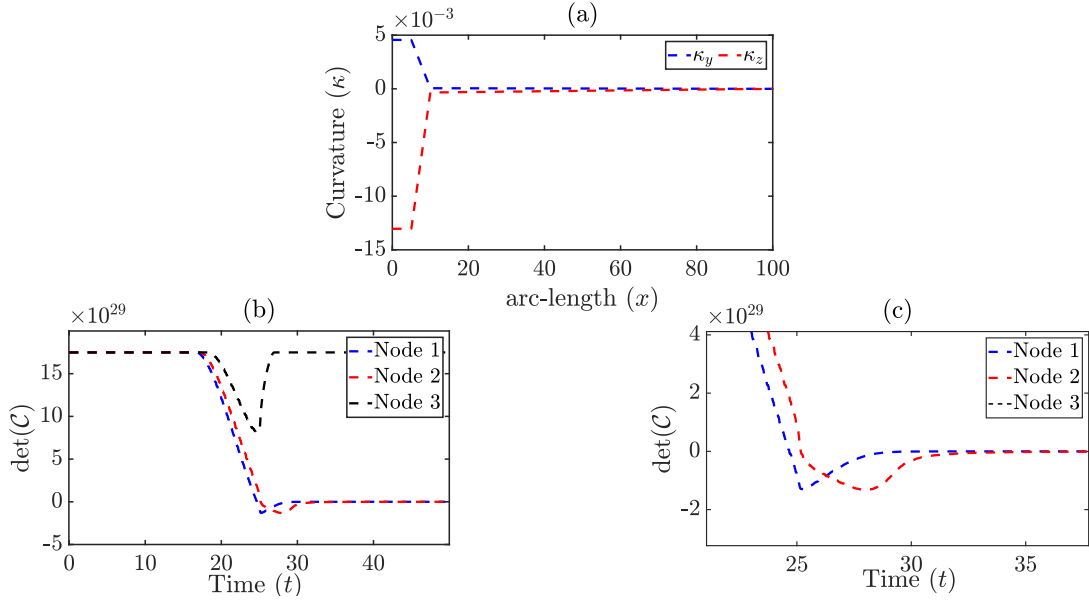


**Figure 2:** Cantilever beam made of nonlinear softening material

The rest of the geometrical and material properties are: effective shear areas  $A_2 = A_3 = 8.3333$ , torsional moment of inertia  $J_t = 20.8333$ , shear modulus  $G = 7692$ , maximum yield stress  $\sigma_y = 50$ , yield strain  $\varepsilon_y = 0.0025$ , ultimate strain  $\varepsilon_u = 0.0075$ . The load is applied incrementally at the tip of the beam up to  $\mathbf{f}_e = [0.1, -1, -1]^T$ . The present analysis is carried out quasi-statically thus the inertial effects are neglected ( $\rho = 0, \mathbf{J}_\rho = \mathbf{0}$ ).



**Figure 3:** Load-displacement diagram: (a)  $\lambda$  vs.  $u_x$ , (b)  $\lambda$  vs.  $u_y$ , (c)  $\lambda$  vs.  $u_z$



**Figure 4:** (a) Variation of curvature along the length of the beam, (b) Variation of determinant of tangent modulus ( $\det(\mathcal{C})$ ) vs. time (element-1), (c) Magnified view of the variation of determinant of tangent modulus vs. time,.

**Table 1:** Convergence at critical point.

Iteration	1	2	3	4	5
$\min(\ \mathbf{R}\ _2, \ \delta\mathbf{W}\ _2)$ e = 10, order = 2, $h = 0.05$	0.0325	$5.1575 \times 10^{-4}$	$1.3301 \times 10^{-7}$	$2.3618 \times 10^{-12}$	
$\min(\ \mathbf{R}\ _2, \ \delta\mathbf{W}\ _2)$ e = 10, order = 3, $h = 0.1$	1.2790	0.1851	0.0178	$1.6114 \times 10^{-4}$	$1.4343 \times 10^{-9}$

In the present analysis the beam was modeled with 10 elements of order 2 and 3 with an initial step size  $h = 0.1$ . For the evaluation of the cross-sectional integrals,  $40 \times 40$  Gaussian points were selected. The results of the load-displacement responses are compared with that obtained using constant strain based elements [1]. The formulation in [1] is also based on geometrically exact beam model where the authors assume constant strains within a short element resulting in very simple and robust formulation. In contrast to the formulation in [1] our approach is based on average velocities and angular velocities, while the strains are evaluated from the compatibility equations which results in a nonconstant distribution of strains over the length of each element. Note that our formulation results in superior computational performance compared to the one in [1] and comparable numerical results. Using the present approach the localization occurs at the clamped end of the cantilever beam. The load-displacement responses at the free end of the cantilever beam are shown in figures 3 (a-c). The results show a very good agreement with the reference results. The skewed snap-through response at a lower load level can be observed with the higher order element (10 elements, order 3) which can be attributed to

increased mesh density close to the clamped end. Figures 4 (a-b) indicate that the localization of strains is limited to the first element resulting in peak like response in curvatures close to the clamped end. Additionally, the table 1 also shows the quadratic convergence behaviour close to the critical point which shows the robustness of the implemented path-following method.

## 6 Conclusion

In the present work we have successfully implemented the strain softening model into the velocity-based formulation of three-dimensional beams. Efficiency and robustness of the proposed method is based on suitable detection of singularity point together with elegant way of expressing the path following constraint. Numerical studies show excellent computational performance of the proposed algorithm.

## 7 Acknowledgements

This work was supported by the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 860124. The support is gratefully acknowledged. This work reflects only the author's view and the Research Executive Agency is not responsible for any use that may be made of the information it contains.

## Bibliography

- [1] Česarek, P., Saje, M., Zupan, D. Kinematically exact curved and twisted strain-based beam. *International Journal of Solids and Structures*, 49(13):1802–1817, 2012.
- [2] Fafard, M., Massicotte, B. Geometrical interpretation of the arc-length method. *Computers and Structures*, 46(4):603–615, 1993.
- [3] Sudhanva Kusuma Chandrashekhara and Dejan Zupan. *Velocity based elements for the quasi-static analysis of beams and frames*, page 23–30. 2021.
- [4] K. Pirmanšek, P. Češarek, D. Zupan, and M. Saje. Material softening and strain localization in spatial geometrically exact beam finite element method with embedded discontinuity. *Computers and Structures*, 182:267–283, 2017.
- [5] Simo, J.C., Vu-Quoc, L. On the dynamics in space of rods undergoing large motions - a geometrically exact approach. *Computer Methods In Applied Mechanics and Engineering*, 66(2):125–161, 1988.
- [6] Zupan, E., Zupan, D. On conservation of energy and kinematic compatibility in dynamics of nonlinear velocity-based three-dimensional beams. *Nonlinear Dynamics*, 95:1379–1394, 2019.



## *Analiza vpliva kontaktne nelinearnosti na akumulacijo poškodbe pri vibracijskem utrujanju*

Urban Cotič<sup>1</sup>, Martin Česnik<sup>1</sup> in Miha Boltežar<sup>1</sup>

### *Effect of contact non-linearity on damage accumulation in case of vibration fatigue*

**Povzetek.** Narava realnih dinamskih sistemov, kot je npr. uležajenje rotorja s krogličnimi ležaji, je v osnovi nelinearna. V tem delu je obravnavan odziv nelinearnega dinamskega sistema z dvema prostostnima stopnjama kot primer poenostavljenega realnega sistema. Kontakt je v sistem vključen v obliki bilinearne togosti, odziv pa je določen z numerično integracijo v časovni domeni. Odziv sistema je bil analiziran za 2 tipa kinematskega vzbujanja; sinusni prelet in naključni signal. Ugotovljeno je bilo, da pride ob uvedbi nelinearnosti v obeh primerih do porasta hitrosti akumulacije poškodbe. Podrobneje so bile analizirane statistične značilke odziva sistema (sploščenost in poševnost), ki izkazujejo korelacijo s hitrostjo akumulacije poškodbe. Izvedena je bila primerjava med frekvenčnimi in časovnimi števničnimi metodami pri obravnavi nelinearnih sistemov.

**Abstract.** The nature of real dynamic systems, e.g. fixating a rotor via ball bearings is in itself non-linear. The response of a non-linear, two degree-of-freedom dynamic system, as an example of a simplified real system, was analysed in this work. Non-linearity was introduced in the system in the form of bi-linear stiffness and the response was determined with numeric integration in the time domain, with the system being excited with sine sweep as well as random signal excitation. An increase in damage rate was identified in both cases of excitation. Further analysis of statistical parameters, which exhibit a correlation with the damage rate (skewness and kurtosis) was made. A comparison was made between time and frequency counting methods for non-linear system analysis.

## 1 Uvod

Z vse večjo potrebo po natančnem popisu odziva kompleksnih dinamskih sistemov, je v inženirski praksi obravnavana sistema kot nelinearnega vse bolj aktualna [9, 12]. Nelinearnost sistema se lahko izkazuje kot nepričakovan ojačan odziv alternatorja na mestu uležajenja gredi pri določeni frekvenci, nenadno povečanje togosti in s tem lastne dinamike strukture, itd. Namen dela je

---

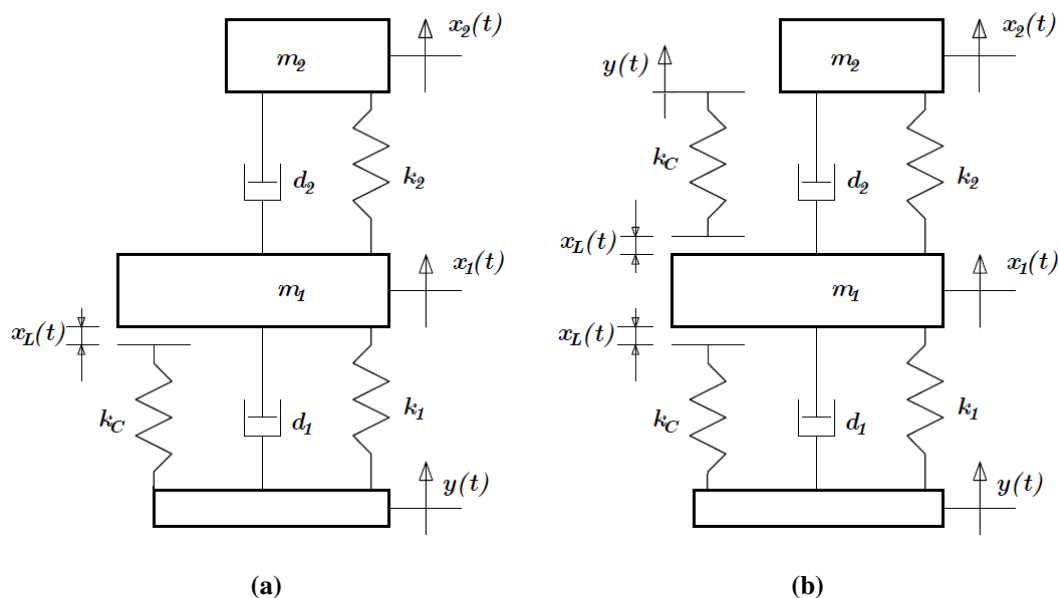
<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

obravnava dinamskega sistema s kontaktno nelinearnostjo, ki se v samem sistemu izrazi kot bi-linearna togost [2]. Vpliv take nelinearnosti na akumulacijo poškodbe in statistične značilke je bil že do neke mere raziskan [11], prav tako pa vpliv statističnih značilok vzbujanja na odziv sistema [3], [10], v tem delu pa bomo to nadalje raziskali in podrobneje analizirali povezavo statističnih značilok na akumulacijo poškodbe. V poglavju 2.1 bo predstavljen nelinearen sistem z dvema prostostnima stopnjama, v poglavju 3 bo obravnavan časovni odziv takega sistema na vzbujanje s sinusnim preletom in naključnim signalom. Sledi vrednotenje odzivov z vidika utrujanja ter primerjava števnih metod. Poglavje 4 podaja zaključke.

## 2 Teoretične osnove

### 2.1 Nelinearen dinamski sistem z dvema prostostnima stopnjama

Obravnavamo viskozno dušen nelinearen dinamski sistem [8] z dvema prostostnima stopnjama, prikazan na sliki 1. Kontaktna togost  $k_C$  deluje le na prvo maso,  $m_1$ . Na sliki 1a je prikazan sistem z enostransko kontaktno nelinearnostjo, na sliki 1b pa z dvostransko. Zračnost  $x_L(t)$  je pogojena s pomikom podlage  $y(t)$ , preko katere je sistem kinematsko vzbujan. Kontaktna nelinearnost je v sistemu modelirana z bilinearno karakteristiko vzmeti. V trenutku, ko je relativni pomik  $x_1(t) - y(t)$  mase  $m_1$  večji ali enak zračnosti  $x_L(t)$ , je v sistem uvedena kontaktna togost  $k_C$ . V primeru, ko se togost sistema poveča za nekaj redov, je učinek nelinearnosti analogen pojavu udarca oz. kontakta.



**Slika 1:** Obravnavan dinamski sistem; a) enostranski kontakt, b) dvostranski kontakt.



Ko je sistem (slika 1b) v brezkontaktnem stanju, je njegov odziv določen z naslednjo enačbo:

$$\begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} d_1 + d_2 & -d_2 \\ -d_2 & d_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 \\ -k_2 & k_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} k_1 y + d_1 \dot{y} \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (1)$$

V trenutku, ko nastopi stanje kontakta, pa gibalno enačbo sistema zapišemo kot:

$$\begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \ddot{x}_1 \\ \ddot{x}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} d_1 + d_2 & -d_2 \\ -d_2 & d_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} k_1 + k_2 + k_C & -k_2 \\ -k_2 & k_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} k_1 y + d_1 \dot{y} \\ 0 \end{Bmatrix}. \quad (2)$$

Ker je namen dela razvoj modela z možnostjo razširitve na več prostostnih stopenj in različnih vrst nelinearnosti, odziv računamo numerično, kar se za ta namen izkaže ustrežnejše od analitičnega pristopa, npr. z metodo perturbacij ali z metodo inkrementalnega harmoničnega ravnovesja (ang. *incremental harmonic balance*). Na sliki 1 je zračnost  $x_L(t)$  pogojena s pomikom podlage, torej je kontakt "pomičen". V kolikor bi bila vrednost zračnosti neodvisna od pomika podlage in hkrati konstantna, bi bil kontakt "nepomičen".

Numerično integracijo izvajamo z eksplicitno Runge-Kuta metodo 4. reda [5], ki je v programski kodi jezika Python implementirana s funkcijo *solve\_ivp* [1]. Rezultate integracije zapišujemo v kontinuirani obliki s kvartično interpolacijo, kar je nujno za stabilnejše zaznavanje kontaktnega stanja. Za stabilno integracijo je nujna izbira ustreznega časovnega koraka, pri čemer je cilj identificirati največji časovni korak, pri katerem bo integracija še vedno robustna. Pri časovni integraciji sistema ob vsaki iteraciji preverjamo pogoj kontakta, ki definira gibalno enačbo sistema. Vodilno en. (1) uporabimo, v kolikor je izpolnjen pogoj  $|x_1(t)| > x_L^{***}$ , v nasprotnem primeru računamo po en. (2).

## 2.2 Akumulacija poškodb

Akumulacija poškodbe zaradi cikličnih obremenitev je neposredno pogojena s številom ciklov in amplitudo napetosti, kateri je struktura izpostavljena na kritičnem mestu. Napetost je v primeru sistema z dvema prostostnima stopnjama odvisna od razlike pomikov  $x_{rel} = x_1(t) - x_2(t)$ , kar je vhodni podatek za analizo akumulacije poškodbe in utrujanja. V delu je poškodba računana po Minerjevem linearnem pravilu akumulacije poškodbe, ki je definirano kot [6]:

$$D_i = \frac{n_i}{N_{i,f}}, \quad (3)$$

kjer je  $n_i$  število ciklov amplitude  $i$  in  $N_{i,f}$  št. ciklov do porušitve pri tej amplitudi. Do porušitve pride torej, ko velja  $\sum D_i = 1$ . Utrujenje materiala v splošnem ločimo v malociklično in visokociklično, v tem delu bo obravnavano visokociklično utrujanje ( $> 5 \cdot 10^4$  ciklov).

Število obremenitvenih ciklov računamo s pomočjo števnih metod, ki jih v osnovi ločimo na časovne in frekvenčne. V tem delu je kot časovna števna metoda uporabljena štiri-parametrična Rainflow metoda [7], kot frekvenčna pa Dirlik-ova metoda [4]. Slednja predpostavi kombinirano porazdelitev gostote verjetnosti amplitud obremenitvenih ciklov, sestavljeno iz eksponentne in dveh Rayleigh-evih porazdelitev.

### 3 Rezultati

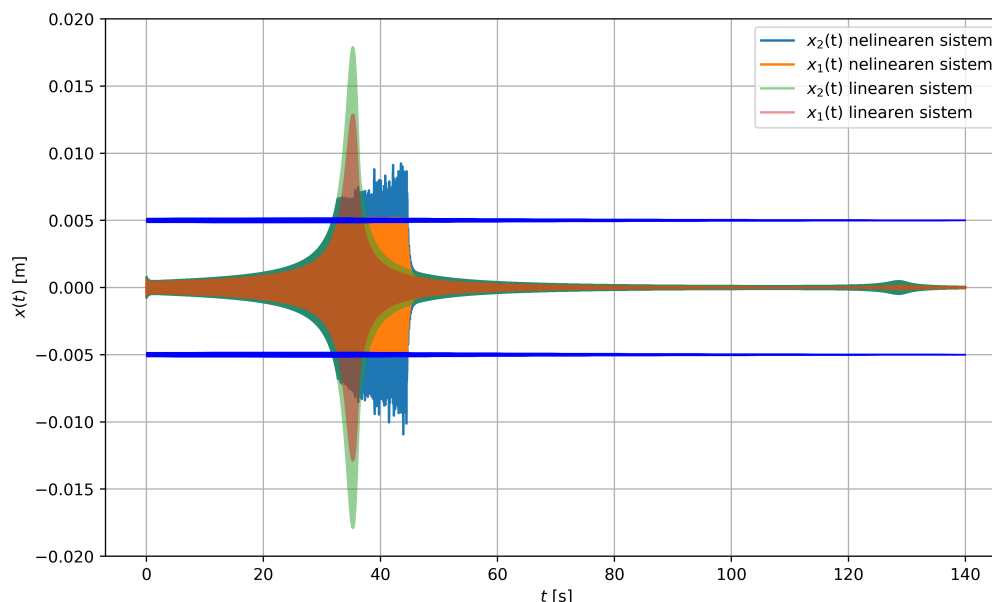
V nadaljevanju bo obravnavan dinamski sistem (slika 1) s prostorskimi in modalnimi parametri, prikazanimi v tabeli 1. Vrednosti parametrov so izbrane kot približki realnega dinamskega sistema, kakršnega bi bilo mogoče izdelati za namen eksperimentalne validacije.

**Tabela 1:** Parametri obravnavanega dinamskega sistema.

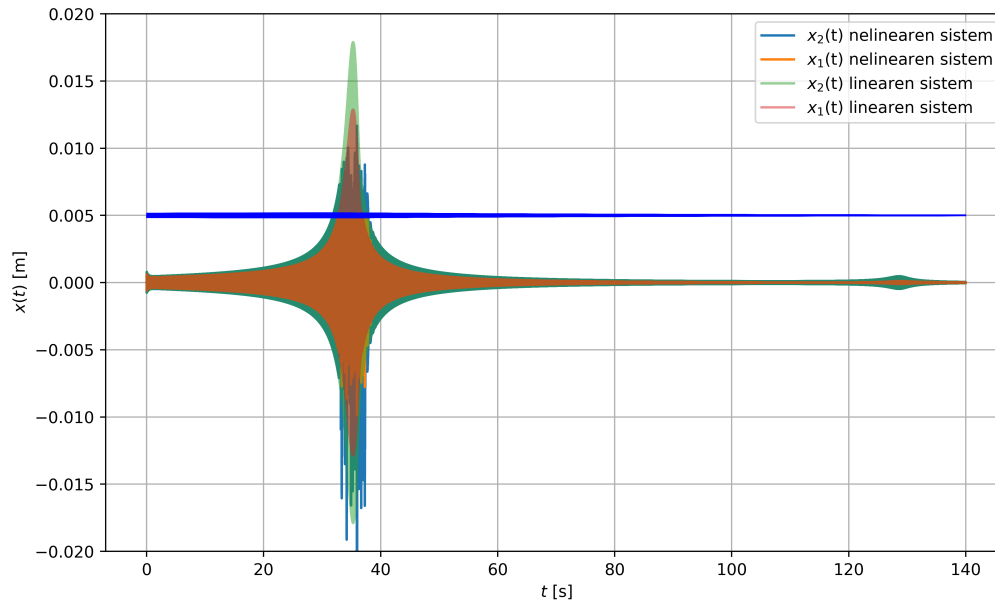
Veličina	Vrednost	Veličina	Vrednost
$m_1$	0,5 kg	$d_1$	5,81 Ns/m
$m_2$	0,08 kg	$d_2$	1,85 Ns/m
$k_1$	150,0 kN/m	$f_1$	78,85 Hz
$k_2$	70 kN/m	$f_2$	164,6 Hz
$k_c$	10000 kN/m		

#### 3.1 Sinusni prelet

Sistem vzbujamo kinematsko s predpisanim pospeškom  $\ddot{y}(t)$  v obliki sinusnega preleta v frekvenčnem območju od 60 do 180 Hz in amplitudo  $a_{exc} = 15 \text{ m/s}^2$ . Na sliki 2 je prikazan odziv sistema z dvostranskim, na sliki 3 pa z enostranskim kontaktom. Z modro je izrisan pomik vzmeti  $k_C(t)$ , ki je v primeru pomičnega kontakta določen s kinematskim vzbujanjem. Na slikah 2 in 3 je za primerjavo prikazan tudi odziv linearnega sistema brez prisotnosti  $k_C$ . Sistem je vzbujan v območju prvih dveh lastnih frekvenc, pri čemer je amplituda odziva izrazito višja v območju prve lastne frekvence.



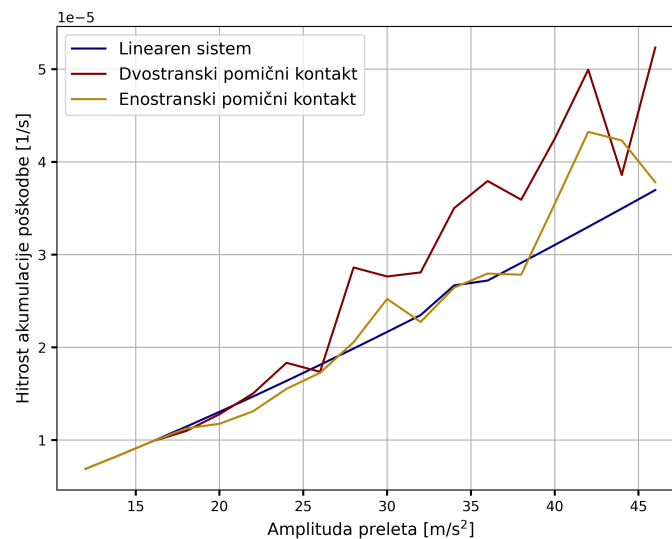
**Slika 2:** Odziv sistema z dvostranskim pomičnim kontaktom, vzbujanega s sinusnim preletom.



**Slika 3:** Odziv sistema z enostranskim pomičnim kontaktom, vzbujanega s sinusnim preletom.

### 3.1.1 Akumulacija poškodbe pri vzbujanju s sinusnim preletom

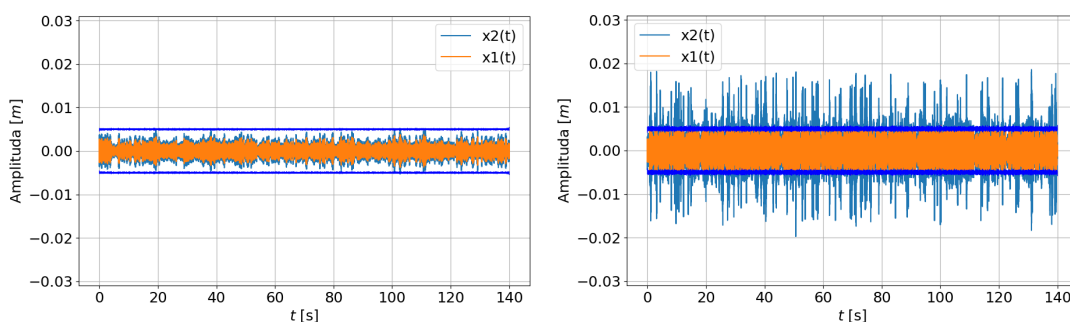
Iz časovnega profila odzivov opazimo, da se največja amplituda odziva z uvedbo nelinearnosti zmanjša, je pa ojačan odziv prisoten dalj časa, torej več ciklov. Poglejmo si, kako to vpliva na utrujanje strukture. Slika 4 prikazuje hitrost akumulacije poškodbe, računano z Rainflow števno metodo, v odvisnosti od amplitude vzbujanja. Hitrost akumulacije poškodbe je definirana kot skupna akumulirana poškodba, normirana na časovno enoto. V primeru sinusnega preleta je glede na rezultate dvostranski kontakt bolj kritičen od enostranskega z vidika utrujanja.



**Slika 4:** Hitrost akumulacije poškodbe v odvisnosti od amplitude vzbujanja.

### 3.2 Vzbujanje z naključnim signalom

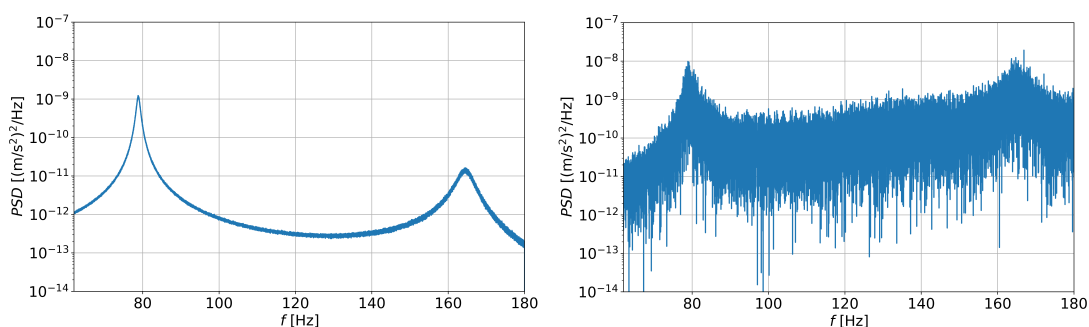
V nadaljevanju bo obravnavan odziv sistema na vzbujanje z naključnim signalom, ki je bil definiran v obliki močnostnega spektra pospeška podlage s konstantnim nivojem v frekvenčnem območju 60 Hz - 180 Hz. Za jasnejšo predstavo je na sliki 5 prikazana sekvenca časovnih odzivov z naraščajočo amplitudo vzbujanja in na sliki 6 pripadajoči močnostni spektri odziva. Ob pojavu kontakta opazimo močno povečan šum v močnostnem spektru odziva (slika 6b), poleg tega pa pride do povečanja amplitude v območju prve lastne frekvence in še izraziteje v območju druge lastne frekvence. V tem primeru pride do višje amplitude močnostnega spektra v območju med prvo in drugo lastno frekvenco (120 Hz).



(a) Amplituda vzbujanja  $0,3 \text{ (m/s}^2\text{)}^2/\text{Hz}$

(b) Amplituda vzbujanja  $0,8 \text{ (m/s}^2\text{)}^2/\text{Hz}$

**Slika 5:** Odziv sistema z dvostranskim pomičnim kontaktom pri naraščajoči amplitudi naključnega vzbujanja.



(a) Amplituda vzbujanja  $0,2 \text{ (m/s}^2\text{)}^2/\text{Hz}$

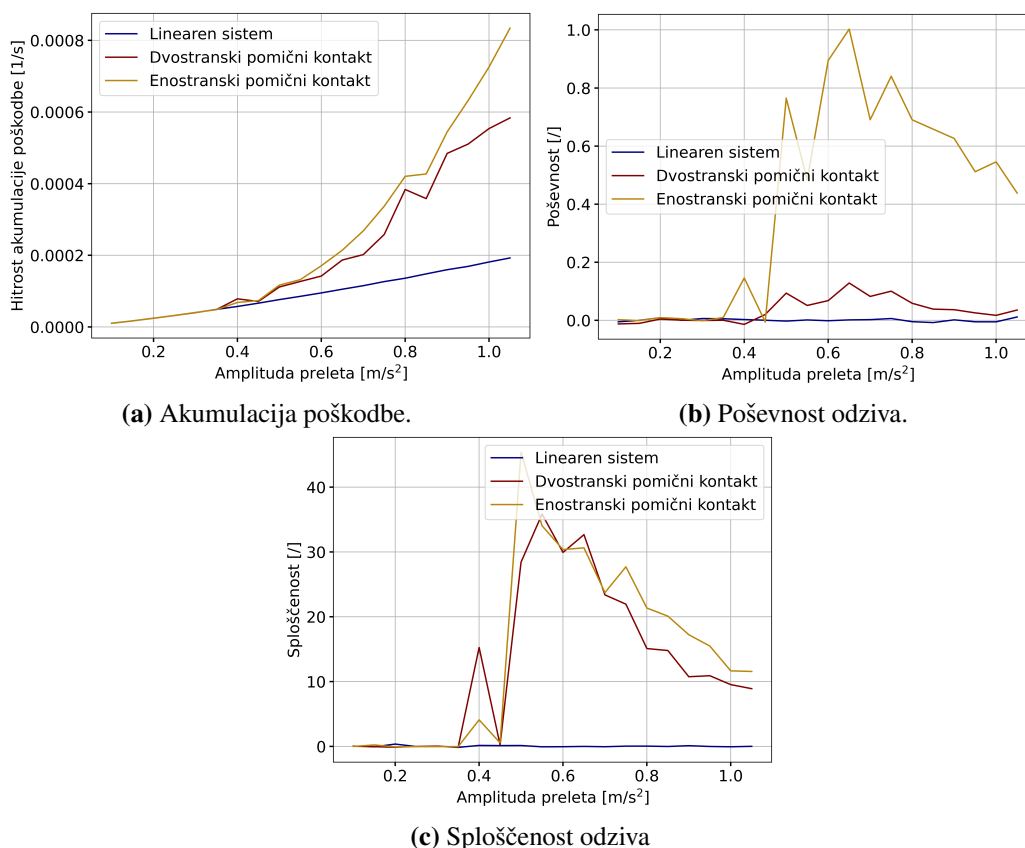
(b) Amplituda vzbujanja  $0,8 \text{ (m/s}^2\text{)}^2/\text{Hz}$

**Slika 6:** Močnostna spektra razlike pomikov sistema z dvostranskim pomičnim kontaktom z naraščajočo amplitudo naključnega vzbujanja.

#### 3.2.1 Akumulacija poškodbe pri vzbujanju z naključnim signalom

Tako, kot smo to storili za primer sinusnega preleta, obravnavajmo še utrujanje sistema, vzbujanega z naključnim signalom. Ob pojavu nelinearnosti v sistemu opazimo nesorazmeren porast

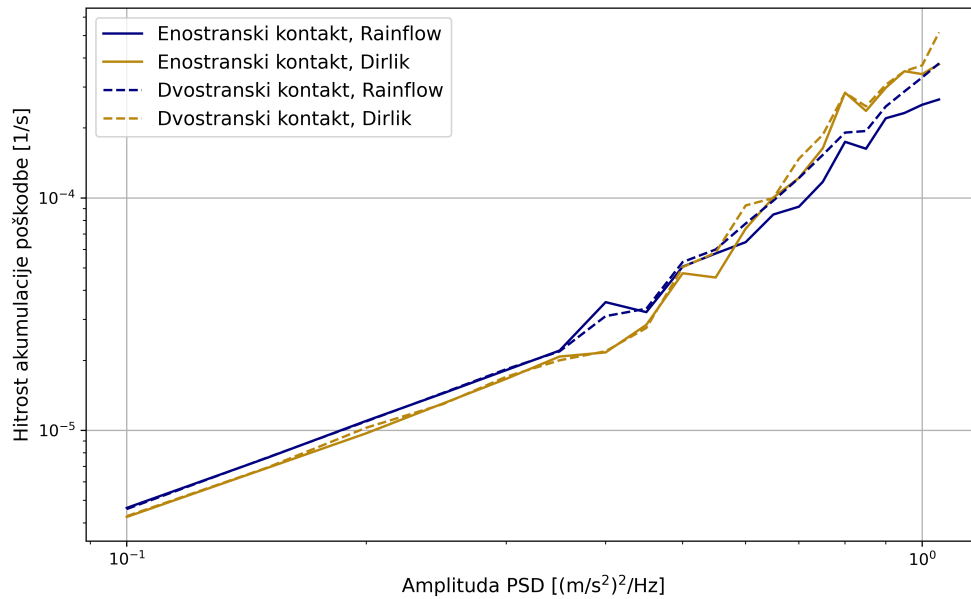
akumulacije poškodbe, prav tako pa narasteta vrednosti poševnosti in sploščenosti. Ob nadaljnjem povečevanju amplitude vzbujanja pride po ponovnega upada vrednosti obeh spremenljivk. V primeru vzbujanja z naključnim signalom je enostranski kontakt bolj kritičen od dvostranskega z vidika utrujanja. Višja hitrost akumulacije poškodbe v primeru enostranskega kontakta se jasno odraža tudi v vrednosti statističnih spremenljivk.



**Slika 7:** Analiza akumulacije poškodbe sistema v odvisnosti od amplitude vzbujanja z naključnim signalom.

### 3.3 Primerjava časovnih in frekvenčnih števni metod pri odzivu nelinearnega sistema

V nadaljevanju bomo analizirali občutljivost Dirlik-ove metode na nelinearnosti v sistemu in smotrnost analize nelinearnega sistema s frekvenčno metodo. Za validacijo metode vzamemo rezultat Rainflow števne metode kot referenco. Na sliki 8 je prikazan rezultat analize hitrosti akumulacije poškodbe sistema pri naraščajoči amplitudi naključnega vzbujanja. Izrisani so rezultati za dvostranski, prav tako pa enostranski kontakt. Ko v sistem vnesemo nelinearnost, se predpostavke, na katerih temelji frekvenčna števna analiza porušijo in pride do odstopanja med rezultati. Vredno je komentirati, da je odstopanje med rezultati časovne in frekvenčne števne metode v nelinearnem področju manjše, kot bi mogoče pričakovali. Poleg tega se za visoke stopnje nelinearnosti izkaže za konzervativnejšo od časovne.



**Slika 8:** Akumulacija poškodbe nelinearnega sistema po Rainflow časovni metodi oz. Dirlik frekvenčni števni metodi.

#### 4 Povzetek in zaključek

V sklopu dela je bil obravnavan poenostavljen diskretiziran nelinearni dinamski sistem z vidika dinamskega utrujanja. Ideja je bila osnovana na izzivih obravnave dejanskih struktur, ki izkazujejo nelinearno naravo v območjih lastnih frekvenc, kar pogosto privede do izrazito pospešenega utrujanja materiala. Z numerično integracijo je bil računani časovni odziv na vzburjanje s sinusnim preletom in naključnim signalom. Pokazano je bilo, da se ob uvedbi bi-linearne togosti v sistem poškodba hitreje akumulira, kar lahko posredno zaznamo tudi preko statističnih značilnosti sploščenosti in poševnosti. Dokazano je bilo, da je mogoče z računsko učinkovitejšimi frekvenčnimi števni metodami zaznati trende akumulacije poškodbe. Smotrni naslednji korak dela bi bila validacija računanja in nadaljnja nadgradnja modela.

## 5 Literatura

- [1] scipy.integrate.solve\_ivp. Dostopno na: [https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve\\_ivp.html](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve_ivp.html). ogled: 9.5.2022.
- [2] U. Andreaus, L. Placidi, in G. Rega. Numerical simulation of the soft contact dynamics of an impacting bilinear oscillator. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 15(9):2603–2616, 2010.
- [3] L. Capponi, M. Česnik, J. Slavič, F. Cianetti, in M. Boltežar. Non-stationarity index in vibration fatigue: Theoretical and experimental research. *International Journal of Fatigue*, 97:1–29, 2017.
- [4] T. Dirlik. *Application of Computers in Fatigue Analysis*. PhD thesis, The University of Warwick, 1985.
- [5] J. Franco. Runge – Kutta methods adapted to the numerical integration of oscillatory problems. *Applied Numerical Mathematics*, 50(3):427–443, 2004.
- [6] Y.-L. Lee, J. Pan, R. B. Hathaway, in M. E. Barkey. *Fatigue Testing and Theory (Theory and Practice)*. Elsevier, Oxford, 2005.
- [7] M. Matsuishi in T. Endo. Fatigue of metals subject to varying stress. *Japan Society of Mechanical Engineers*, 1968.
- [8] N. M. M. Maia in J. M. M. S. Silva. *Theoretical and Experimental Modal Analysis*. Wiley-Blackwell, Oxford, 1997.
- [9] V. Ondra, I. Sever, in C. Schwingshackl. A method for non-parametric identification of non-linear vibration systems with asymmetric restoring forces from a resonant decay response. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 114:239–258, 2019.
- [10] M. Palmieri, M. Česnik, J. Slavič, F. Cianetti, in M. Boltežar. Non-Gaussianity and non-stationarity in vibration fatigue. *International Journal of Fatigue*, 97:9–19, 2017.
- [11] S. A. Rizzi, A. Przekop, in T. L. Turner. On the response of a nonlinear structure to high kurtosis non-Gaussian random loadings. *NTRS - NASA Technical Reports Server*, 2011.
- [12] T. Yang, Q. Cao, in Z. Hao. A novel nonlinear mechanical oscillator and its application in vibration isolation and energy harvesting. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 155:107636, 2021.



## *Numerična analiza mehanskega odziva večslojne kompozitne polimerne strukture žilne opornice*

*Žiga Donik<sup>1</sup>, Branko Nečemer<sup>1</sup>, Srečko Glodež<sup>1</sup>, Janez Kramberger<sup>1</sup>*

### *Numerical analysis of the mechanical performance of a multi-layer composite polymer stent structure*

**Povzetek.** Biorazgradljive žilne opornice so del zadnje generacije tovrstnih medicinskih pripomočkov za manj invazivne srčno-žilne intervencije pri ateroskleroznih obolenjih. Predstavljena je numerična analiza postopka vstavljanja kompozitne žilne opornice iz dveh polimerov. Primerjava rezultatov za različne kombinacije materialov v dveh plasteh strukture je pokazala, da PCL struktura ne nudi zadostne opore, hkrati pa lahko z dodatkom ene plasti PLA izboljšamo togost opornice.

**Abstract.** Bioresorbable stents represent the latest generation of vascular scaffolds used for minimally invasive cardiovascular interventions. A finite element analysis of the stent deployment is presented for a composite stent made of two polymers. The comparison of the results for different combinations of materials in the two layers of the structure showed that the PCL scaffold does not provide sufficient support. The addition of a single layer of PLA can improve the stiffness of the stent.

## 1 Uvod

Srčno-žilne bolezni so vodilni vzrok smrti v svetu in letno terjajo okoli 18 milijonov življenj [12]. Največ smrti je zaradi infarkta ali kapi, katerih najpogostejši vzrok so aterosklerozna obolenja, kjer se znotraj arterijskih sten kopičijo maščobne obloge. Te povzročijo zmanjšanje pretočne površine znotraj žile in oslabijo ali celo prekinejo oskrbo krvi po telesu [4]. Pogost neinvaziven poseg za zdravljenje je angioplastika z balonom in vstavljanje žilne opornice [11]. Na mestu zožitve se s pomočjo katetra najprej napihne balon, ki razširi arterijo in omehča oblogo, nato pa se v žilo vpelje nov sistem z žilno opornico, ki se na predvidenem mestu s pomočjo balona razširi in plastično deformira, ter s tem preprečuje ponovno zožitev arterije in vzpodbuja obnovitev žilne stene [9].

Žilne opornice so izdelane iz biokompatibilnih kovin ali zlitin, ki strukturi dajejo zadostno radialno togost, hkrati pa fleksibilnost, ki je potrebna za prilagoditev obliki žile [3]. Slabost kovinskih žilnih opornic je, da trajno ostanejo v telesu in sprožajo neželen odziv telesa na

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo



tujek, hkrati pa se sčasoma povečuje nevarnost za njihov prelom in dodatne poškodbe na žili [5].

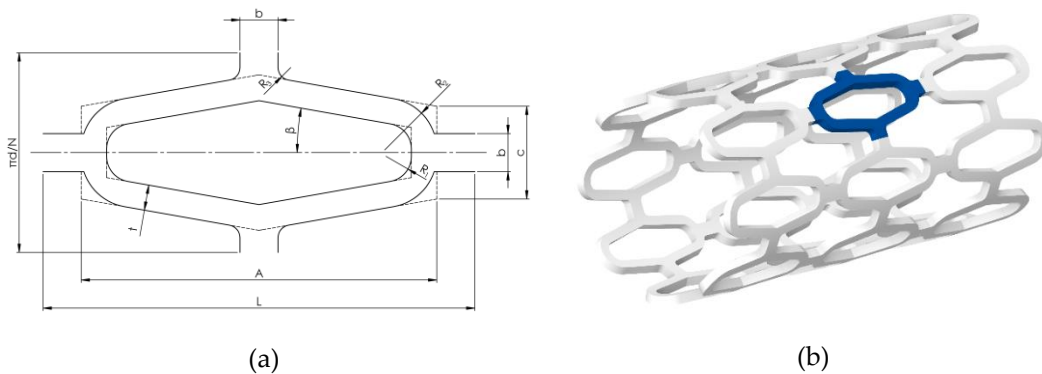
V zadnjem času so v razvoju biorazgradljive žilne opornice. Njihov glavni cilj je nuditi oporo žili ravno dovolj časa, da pride do obnovitve stene (6-12 mesecev) in ponovne vzpostavitve ravnovesja, nato pa naj bi se razgradile [2]. Na tak način bi se lahko izognili dolgoročnim tveganjem pri intervencijah z vstavljanjem žilnih opornic. Imajo slabše materialne lastnosti v primerjavi s kovinami in zlitinami, zato za zagotovitev ustrezne togosti potrebujejo večje dimenzije povezovalnih elementov v celični strukturi, kar pa negativno vpliva na hemodinamske razmere znotraj žile in hkrati povečuje možnost tromboze [10]. Pri konstruiranju biorazgradljivih žilnih opornic je torej potrebno posebno pozornost posvetiti izboljšanju strukture, da bi lahko čim bolj izkoristili material.

Napredek na področju izdelovalnih tehnologij za biomateriale v zadnjih letih predstavlja potencial za združevanje različnih biorazgradljivih polimerov v kompozitne strukture. Z uporabo kompozitov bi lahko izboljšali mehanski odziv biorazgradljivih žilnih opornic pri vstavljanju, zato je fokus te raziskave na analizi mehanskega odziva takšnih kompozitnih struktur opornic. Izvedena je bila numerična simulacija vstavljanja večplastne žilne opornice na podlagi metode končnih elementov znotraj poenostavljene aterosklerozne arterije. Primerjane so bile različne razporeditve plasti dveh izbranih polimernih materialov in njihov vpliv na mehanski odziv kompozitne strukture žilne opornice.

## 2 Metode

### 2.1 Geometrijski model

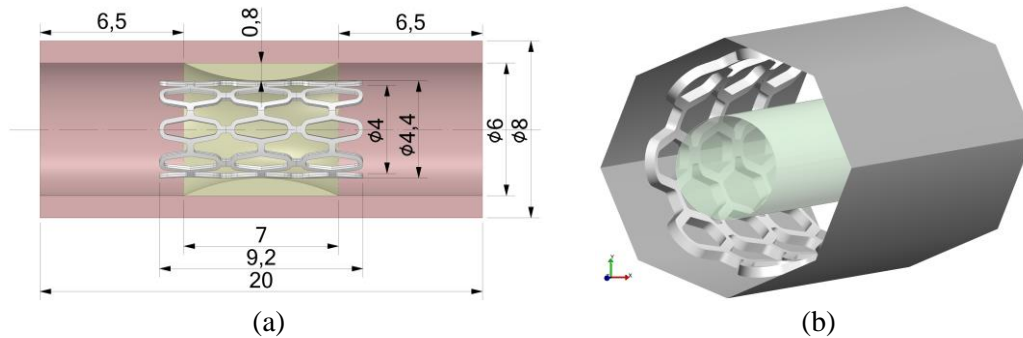
Obnavana žilna opornica je celična struktura z osnovno celico, prikazano na sliki 1a. Celotna struktura ima osem celic po obodu in tri celice po dolžini. Osnovne celice na vsaki strani strukture so zaobljene in brez povezovalnih elementov (slika 1b), celotna dolžina opornice je enaka 9,2 mm, notranji premer je enak 4 mm, zunanji premer pa znaša 4,4 mm.



**Slika 1:** Oblika žilne opornice: (a) Oblika in dimenzije osnovne celice strukture. (b) Celotna opornica s poudarjeno osnovno celico.

Opornica je bila razdeljena na dve enako debeli plasti, od katerih lahko vsaki pripišemo različne materialne lastnosti, da ustvarimo kompozitno strukturo. Konfiguracije so v besedilu označene kot kratice materialov, povezane s pomišljajem, kjer prva kratica predstavlja notranjo plast, druga pa zunanjo (npr. PCL-PLA; PCL - notranja plast, PLA - zunanja plast).

Poleg žilne opornice, so bili v simulaciji uporabljeni še trije elementi: poenostavljen model obolele žile z oblogo, orodje za stiskanje opornice in orodje za razširitev (balon). Dimenzije žile z oblogo so prikazane na sliki 2a skupaj s postavitvijo žilne opornice, na sliki 2b pa sta dodani še orodji za stiskanje (siva) in razširitev (zelena). Začetni premer balona je bil 2 mm, orodje za stiskanje pa je bilo sestavljeno iz osemkotne površine, ki se je na robovih dotikala opornice.



**Slika 2:** Strukturni elementi uporabljeni v simulaciji: (a) Žila in aterosklerozna obloga z dimenzijami (prikaz v prerezu). (b) Orodje za stiskanje (siva), žilna opornica in balon za ekspanzijo (zelena).

## 2.2 Mreža končnih elementov

Geometrija arterije, obloge in žilne opornice je bila zamrežena z 8-vozlješnimi volumskimi končnimi elementi (heksaedri), balon in orodje za stiskanje pa z 4-vozlješnimi površinskimi končnimi elementi. Uporabljeni so bili elementi prvega reda, katerih število je bilo določeno s konvergenčno analizo. Žilna opornica in žila sta po debelini zamreženi s 4 končnimi elementi. Število elementov in vozlišč je prikazano v tabeli 1.

**Tabela 1:** Lastnosti mreže končnih elementov.

Kos	Vrsta končnega elementa	Št. vozlišč	Št. elementov
Žilna opornica	8-vozlješni volumski heksaeder	58.772	43.200
Arterija	8-vozlješni volumski heksaeder	9.315	7.040
Aterosklerozna obloga	8-vozlješni volumski heksaeder	20.972	17.040
Balon	4-vozlješni površinski štirikotnik	4.221	4.000
Orodje za stiskanje	4-vozlješni površinski štirikotnik	21	12

## 2.3 Materiali

Žilna opornica je bila sestavljena iz dveh plasti, katerim smo pripisali dva različna materiala: PCL (polikaprolakton) in PLA (polilaktična kislina). Na tak način smo tvorili štiri različne strukture, dve kompozitni in dve iz posameznega materiala. Izbrana materiala se uporabljata v medicini in sodita med biorazgradljive polimere. Za numerično modeliranje obeh materialov je bil uporabljen poenostavljen bilinearni elastoplastični materialni model, katerega parametri so predstavljeni v tabeli 2.

**Tabela 2:** Lastnosti materialov žilne opornice v raziskavi [9, 10].

Material	Poissonovo število	Modul elastičnosti	Meja plastičnosti	Tangentni modul
PLA	0,33	3000 MPa	65 MPa	30 MPa
PCL	0,33	350 MPa	25 MPa	10 MPa

Konstitutivni model arterije in obloge je bil opisan s hiperelastičnim modelom (Neo-Hooke), ki je pogosto v uporabi za modeliranje bioloških tkiv. Funkcija deformacijske energije je v programu FEBio definirana z  $W = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3) - \mu \ln J + \frac{\lambda}{2}(\ln J)^2$ , kjer sta  $\mu$  in  $\lambda$  Laméjevi konstanti iz linearne elastičnosti, zato lahko za definicijo modela uporabimo modul elastičnosti in Poissonovo število, izpeljani iz Laméjevih konstant. Uporabljen modul elastičnosti za arterijo je bil 0,378 MPa, za aterosklerozno oblogo pa 0,513 MPa [7]. Za oba elementa je bilo Poissonovo število enako 0,49. Material orodja za stiskanje in balona za razširitev je bil modeliran kot material togega telesa.

#### 2.4 Numerična simulacija

Simulacija je bila izvedena s pomočjo odprtokodne programske opreme FEBio [8] in je bila sestavljena iz štirih korakov. Pred vstavljanjem je potrebno opornico stisniti na manjši premer, da se lahko uvede v žilo s pomočjo katetra, zato je bila najprej opornica s pomočjo orodja stisnjena iz notranjega premera 4 mm na notranji premer 2,1 mm. Naslednji korak je bil sprostitvev orodja, kar dovoli opornici, da se do neke mere povrne proti začetnemu stanju preden jo razširimo z balonom. V tretjem koraku je bil balon s predpisanim pomikom v vsakem vozlišču raztegnjen na premer 6 mm. Opornica je bila tako razširjena na 150% prvotnega premera. V zadnjem koraku se balon vrne v začetno stanje (premer 2 mm) in dovoli žilni opornici, da se nekoliko elastično skrči, delno tudi kot posledica radialne obremenitve razširjene arterije.

#### 2.5 Robni pogoji in interakcije

Oblika opornice in ostalih elementov omogoča uporabo simetrije, zato je bila simulacija izvedena s četrtinskim modelom sistema z uporabo ustreznih simetrijskih robnih pogojev.

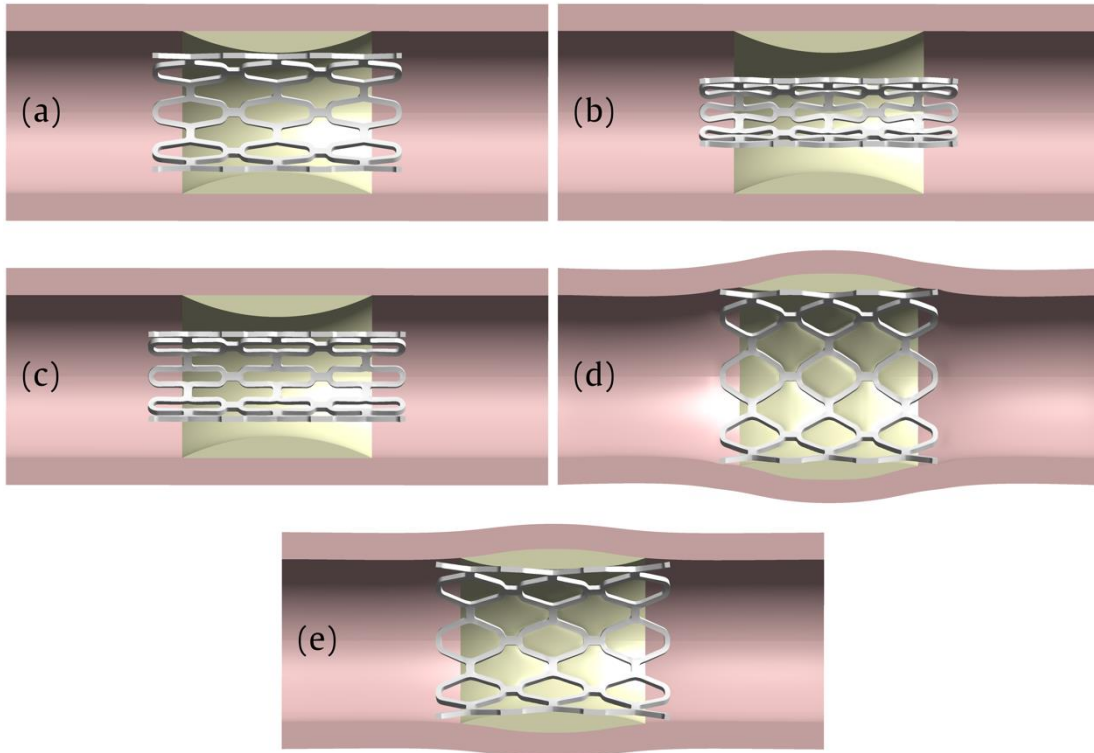
Žila je bila fiksno vpeta (vse prostostne stopnje) na prostih ravnih površinah (kolobarjih) na obeh straneh. Dve vozlišči na žilni opornici sta bili omejeni v aksialni smeri, prav tako so bila v aksialni smeri vpeta vsa vozlišča balona in orodja za stiskanje. Predpisani vozliščni pomiki v radialni smeri na balonu in orodju za stiskanje so bili skladni z vrednostmi in koraki opisanimi v prejšnjem podpoglavju.

Na stiku med arterijo in aterosklerozno oblogo sta bili soležni površini fiksno povezani in relativno gibanje kontaktnih površin v normalni ali tangencialni smeri ni bilo dovoljeno. Vsi ostali kontakti med ostalimi deli so dovolili relativno gibanje kontaktnih površin in ločitev površin po kontaktu. Trenje ni bilo upoštevano.

### 3 Rezultati in diskusija

Rezultati analize zajemajo napetosti, deformacije in pomike. Fokus študije je na primerjavi rezultatov med posameznimi konfiguracijami kompozitnih struktur. Vrednotenje absolutnih

vrednosti napetosti in deformacij ni smiselno, zaradi upoštevanih poenostavitvev. Postopek vstavljanja žilne opornice je predstavljen na sliki 3.



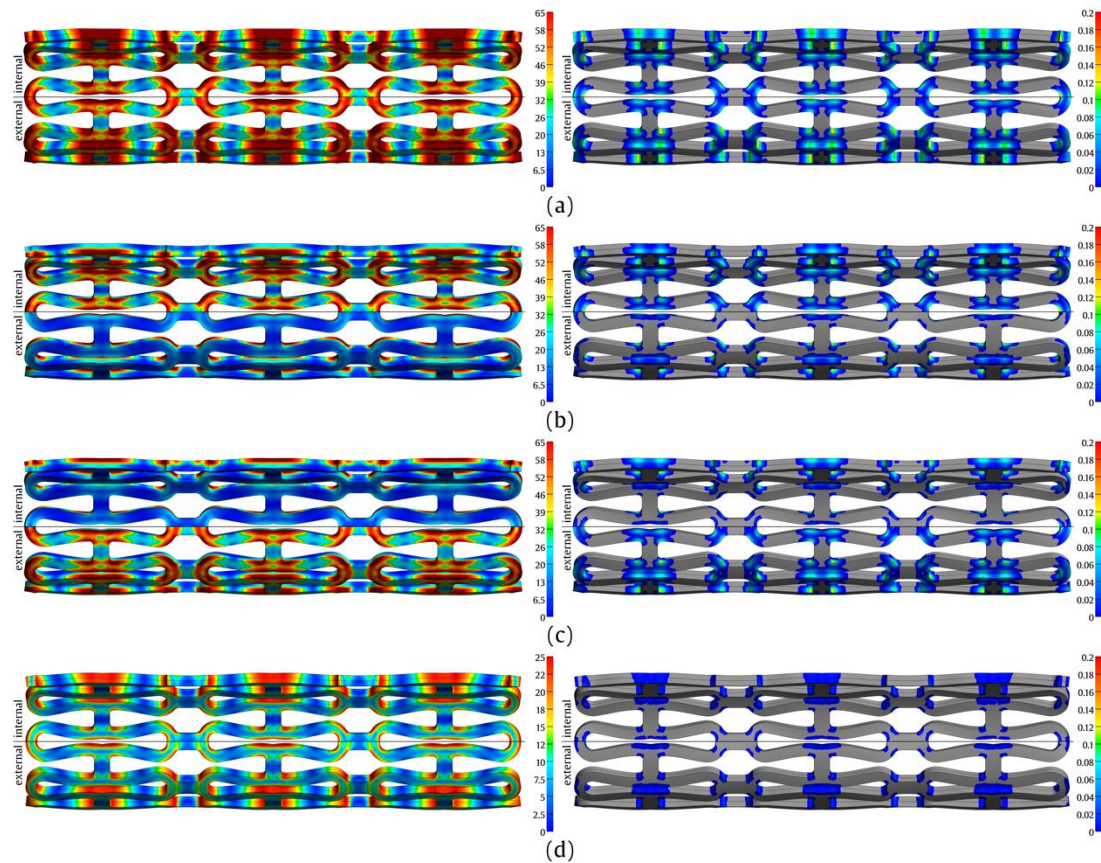
**Slika 3:** Proces vstavljanja žilne opornice: (a) Izhodiščno stanje. (b) Stisnjena žilna opornica, pred odmikom orodja. (c) Stisnjena žilna opornica, po odmiku orodja. (d) Razširjena žilna opornica, pred odstranitvijo balona. (e) Razširjena žilna opornica, po odstranitvi balona.

### 3.1 Napetosti in ekvivalentna plastična deformacija

V vseh korakih simulacije, ki so podrobneje opisani v predhodnih poglavjih, so bile vrednotene napetosti in ekvivalentna plastična deformacija. Na slikah 4, 5, 6 in 7 so zbrani rezultati za vse štiri konfiguracije materialov po vsakem izmed korakov numerične analize. Vsak prikaz žilne opornice je z vodoravno črto ločen na pogled notranje strani opornice (zgoraj, označeno z *internal*) in pogled zunanje strani opornice (spodaj, označeno z *external*), da je razvidna razlika med plastmi iz različnih materialov. Na levi strani so prikazane primerjalne napetosti (von Mises), na desni pa ekvivalentna plastična deformacija.

Na sliki 4 so prikazane napetosti in ekvivalentna plastična deformacija po stiskanju žilne opornice in pred odstranitvijo orodja za stiskanje. Napetosti v opornici v stisnjem stanju pri vseh konfiguracijah presežejo mejo plastičnosti materiala (65 MPa za PLA in 25 MPa za PCL), zato je opazna trajna plastična deformacija. Najvišje primerjalne napetosti so primerljive v vseh konfiguracijah s prisotnim PLA (69-70 MPa). Enako velja za ekvivalentno plastično deformacijo (14-16%). Pri konfiguraciji PCL-PCL se ekvivalentna plastična deformacija (največ 2,9%) pojavi le na manjšem območju, kjer napetosti komaj presežejo mejo plastičnosti. Pri konfiguracijah z mešanima materialoma (PCL-PLA in PLA-PCL) pride do razlike v

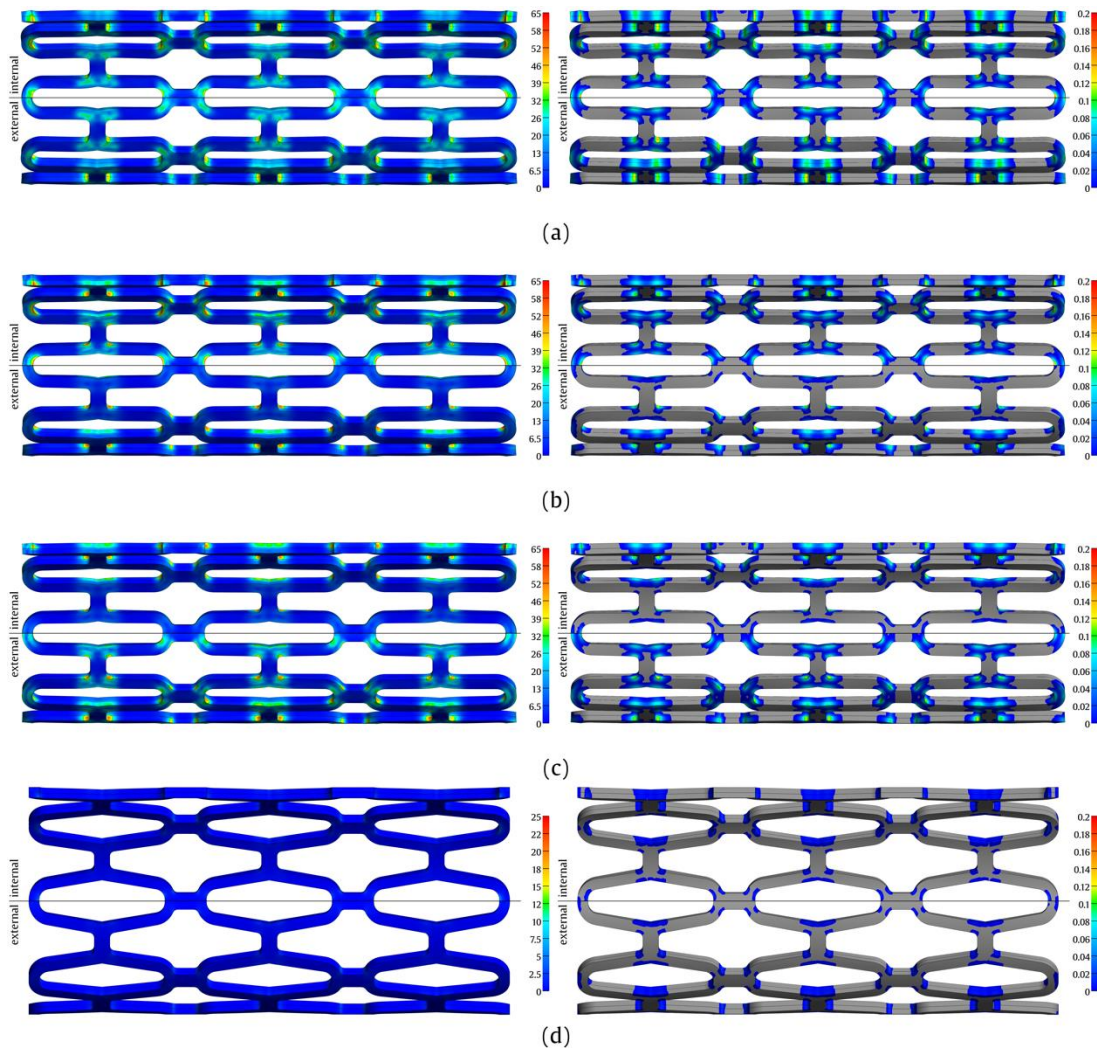
območju plastične deformacije med plastmi, saj napetosti v PCL na manjšem delu presežejo mejo plastičnosti.



**Slika 4:** Primerjalne napetosti v MPa (levo) in ekvivalentna plastična deformacija (desno) za vsako konfiguracijo na koncu prvega koraka analize (stisnjena opornica, pred odstranitvijo orodja): (a) PLA-PLA; (b) PLA-PCL; (c) PCL-PLA; (d) PCL-PCL.

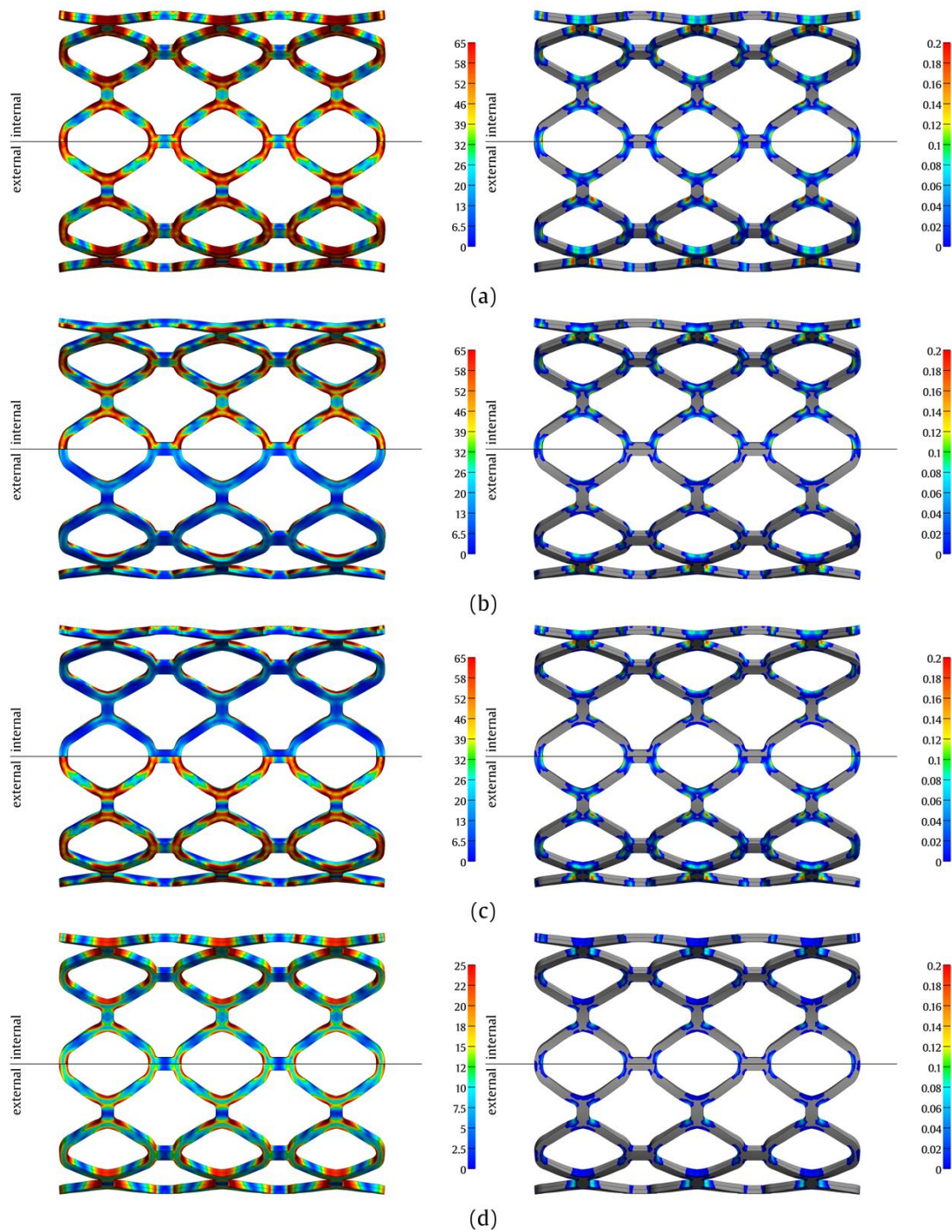
Na sliki 5 so zbrani rezultati za ravnotežno stanje žilne opornice po stiskanju in po odstranitvi orodja. Zaostale napetosti so večje v konfiguracijah z mešanima materialoma, najverjetneje zaradi večjega prenosa obremenitve na bolj tog PLA, ki je podvržen višjim napetostim. Izstopa konfiguracija PCL-PCL, ki se v največji meri povrne proti prvotnemu stanju zaradi majhne stalne plastične deformacije. Tudi zaostale napetosti so majhne v primerjavi z ostalimi konfiguracijami.





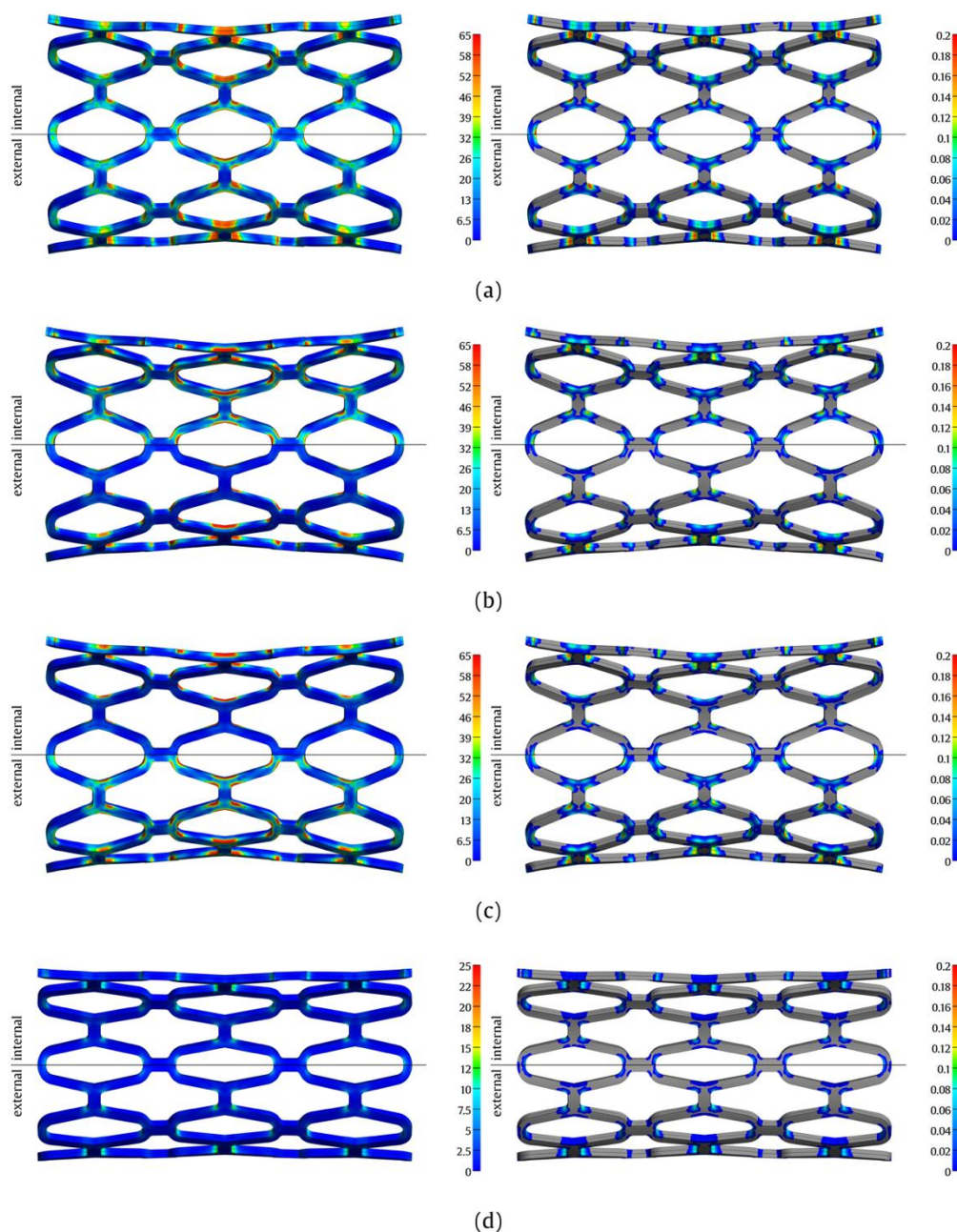
**Slika 5:** Primerjalne napetosti v MPa (levo) in ekvivalentna plastična deformacija (desno) za vsako konfiguracijo na koncu drugega koraka analize (stisnjena opornica, po odstranitvi orodja): (a) PLA-PLA; (b) PLA-PCL; (c) PCL-PLA; (d) PCL-PCL.

Slika 6 prikazuje napetosti in ekvivalentno plastično deformacijo vseh konfiguracij po ekspanziji z balonom in pred odstranitvijo balona, slika 7 pa po odstranitvi balona in vzpostavitvi ravnovesja. Konfiguracije s PLA (slika 6 in 7, a-c) prikazujejo podoben mehanski odziv; napetosti dosežejo 75-77 MPa, ekvivalentna plastična deformacija pa do 21% pri največji razširitvi balona. Rezultati so skoraj identični za konfiguracije z mešanimi materiali (slika 6 in 7, b in c). V strukturi, ki je samo iz PCL (slika 6 in 7, d), napetosti komaj presežejo mejo plastičnosti, zato se stalna deformacija pojavi na zelo majhnem območju v primerjavi z ostalimi strukturami. Po sprostitvi balona se pri vseh konfiguracijah pojavijo zaostale napetosti. Ponovno so rezultati primerljivi za vse konfiguracije z dodanim PLA, izstopa pa PCL-PCL opornica, kateri se po sprostitvi precej bolj zmanjša premer kot ostalim, zato ne zagotavlja ustrezne podpore žili.



**Slika 6:** Primerjalne napetosti v MPa (levo) in ekvivalentna plastična deformacija (desno) za vsako konfiguracijo na koncu tretjega koraka analize (razširjena opornica, pred odstranitvijo balona): (a) PLA-PLA; (b) PLA-PCL; (c) PCL-PLA; (d) PCL-PCL.





**Slika 7:** Primerjalne napetosti v MPa (levo) in ekvivalentna plastična deformacija (desno) za vsako konfiguracijo na koncu četrtega koraka analize (razširjena opornica, po odstranitvi balona): (a) PLA-PLA; (b) PLA-PCL; (c) PCL-PLA; (d) PCL-PCL.

#### 4 Zaključek

Izvedena je bila preliminarna študija mehanskega odziva dvoslojne kompozitne žilne opornice s kombinacijo dveh polimernih materialov, PLA in PCL. Vrednotene so bile primerjalne napetosti in ekvivalentna plastična deformacija. Ugotovljeno je bilo, da uporaba samo PCL



polimera ne zagotavlja ustrezne podpore žili, saj se plastična deformacija ne pojavi na dovolj velikem območju. Ustrezno togost lahko zagotovimo z dodajanjem plasti PLA.

Nadaljnje raziskave na področju uporabe večplastnih kompozitnih struktur v žilni kirurgiji bi bile potrebne za vpeljavo ustrezne izdelovalne tehnologije, skupaj s primerjavo z eksperimentalnimi rezultati. Z uporabo kompleksnejših konstitutivnih modelov bi se lahko s simulacijami bolj približali realnemu obnašanju in ocenili napetostno-deformacijsko stanje materiala. Uporaba kompozitnih struktur žilnih opornic bi lahko omogočila ciljno prilagajanje lastnosti opornic glede na specifične zahteve bolnikov.

## Zahvala

Avtorji se zahvaljujejo Javni agenciji za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije za sofinanciranje raziskovalnega programa št. P2-0063 iz državnega proračuna.

## Literatura

- [1] H. Y. Ang, Y. Y. Huang, S. T. Lim, P. Wong, M. Joner, N. Foin, *Mechanical behavior of polymer-based vs. metallic-based bioresorbable stents*, J. Thorac. Dis., 9, S923–S934, 2017.
- [2] N. Bink, V. B. Mohan, S. Fakirov, *Recent advances in plastic stents: a comprehensive review*, Int. J. Polym. Mater. Polym. Biomater., 70, 54–74, 2021.
- [3] F. Fogarotto, *Finite Element Analysis of Coronary Artery Stenting*, Università degli Studi di Pavia, 2010.
- [4] A. Gisterå, G. K. Hansson, *The immunology of atherosclerosis*, Nat. Rev. Nephrol., 13, 368–380, 2017.
- [5] T. Hu, C. Yang, S. Lin, Q. Yu, G. Wang, *Biodegradable stents for coronary artery disease treatment: Recent advances and future perspectives*, Mater. Sci. Eng. C, 91, 163–178, 2018.
- [6] J. Jerold John Britto, R. Venkatesh, R. Prabhakaran, K. Amudhan, *Design optimization of biomedical stent under the influence of the radial pressure using FEM*, in *Materials Today: Proceedings*, Jan. 2020, 39, 1332–1336.
- [7] A. Karimi, M. Navidbakhsh, A. Shojaei, K. Hassani, S. Faghihi, *Study of plaque vulnerability in coronary artery using mooney-rivlin model: A combination of finite element and experimental method*, Biomed. Eng. - Appl. Basis Commun., 26, 2014.
- [8] S. A. Maas, B. J. Ellis, G. A. Ateshian, J. A. Weiss, *FEBio: Finite elements for biomechanics*, J. Biomech. Eng., 134, 2012.
- [9] F. Migliavacca, L. Petrini, M. Colombo, F. Auricchio, R. Pietrabissa, *Mechanical behavior of coronary stents investigated through the finite element method*, J. Biomech., 35, 803–811, 2002.
- [10] T. Y. Qiu, M. Song, L. G. Zhao, *A computational study of crimping and expansion of bioresorbable polymeric stents*, Mech. Time-Dependent Mater., 22, 273–290, 2018.
- [11] R. Starc, *Primarna koronarna angioplastika - mehanični način odpiranja zaprtih venčnih arterij pri akutnem srčnem infarktu*, Med. Razgl., 38, 383–388, 1999. Accessed: Aug. 24, 2021. [Online]. Available: <http://www.dlib.si/?URN=URN:NBN:SI:DOC-2ZU51OLJ>
- [12] World Health Organization, *Cardiovascular diseases*, 2021. <https://www.who.int/health-topics/cardiovascular-diseases> (Mar. 15, 2022).



## *Numerična analiza lameliranih lepljenih nosilcev z zobatimi spoji*

Barbara Fortuna<sup>1</sup>, Goran Turk<sup>1</sup> in Simon Schnabl<sup>1,2</sup>

### *Numerical analysis of glued laminated beams with finger joints*

**Povzetek.** V prispevku predstavimo numerični model ravninskega lameliranega lepljenega nosilca z upoštevanjem zdrsa med lamelami ter vpliva zobatih spojev. Model je osnovan na Reissnerjevi teoriji nosilcev. Prikazujemo osnovne enačbe numeričnega modela ter sistem diskretnih Euler-Lagrangevih enačb. Model smo preverili z rezultati iz literature. Rezultate modela smo primerjali tudi z rezultati eksperimentov. Pri tem smo vhodne podatke upoštevali deterministično in stohastično. Na ta način smo pokazali, da model predstavlja uporabno računsko orodje za modeliranje lameliranih lepljenih nosilcev z upoštevanjem zobatih spojev in zdrsa med lamelami.

**Abstract.** In this paper the numerical model of planar glued laminated beam is presented. The interlayer slip is taken into account together with the influence of finger joints. The model is based on the Reissner beam theory. The basic equations and the system of discrete Euler-Lagrange equations used for the numerical model are presented. The model is verified with the results from the literature and validated with the results from experimental tests. The input data was considered deterministically and stochastically. In this way we showed that the presented numerical model is an efficient computational tool for analysis of glued laminated beams considering influence of the finger joints and interlayer slip.

## 1 Uvod

Uporaba lameliranih lepljenih nosilcev v konstrukcijske namene vztrajno narašča in praktično že povsem nadomešča žagan les v konstrukcijah, še posebej v konstrukcijah, kjer je zahtevana višja nosilnost. Lepljenje lesa omogoča izboljšanje mehanskih lastnosti lesenih konstrukcijskih elementov, saj lahko izločimo šibkejše dele lesa, na ta način pa se zmanjša tudi količina odpadnega lesa v primerjavi z žaganim lesom. Zobati spoji imajo pomembno vlogo v lameliranih lepljenih nosilcih [1] tudi zato ker pogosto predstavljajo šibko točko nosilca, še posebej, če

---

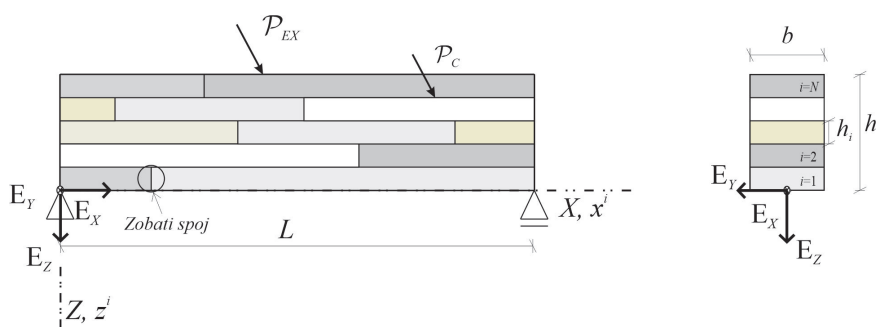
<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo

<sup>2</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo

se ta pojavi v območju največjih napetosti nosilca. Poznavanje obnašanja tovrstnih nosilcev je torej bistvenega pomena pri načrtovanju sodobnih lesenih konstrukcij. V ta namen smo na osnovi Reissnerjeve teorije ravninskih nosilcev [7] izpeljali numerični model, ki omogoča izvedenost kinematičnih in ravnotežnih količin lameliranih lepljenih nosilcev ob upoštevanju strižnega deformiranja, zdrsa med lamelami in vpliva zobatih spojev. V prvem delu so predstavljene osnovne enačbe, v drugem delu pa je prikazana uporaba numeričnega modela. Ker je les izrazito heterogen material, njegovih mehanskih lastnosti pa z nedestruktivnimi metodami ne moremo enolično predvideti, je prikazana tudi možnost uporabe numeričnega modela za analizo, kjer so vhodni materialni podatki upoštevani stohastično.

## 2 Osnovne enačbe

Obravnavamo lamelirani lepljeni nosilec s poljubnim številom lamel  $N$ . Dolžina posamezne lamele  $i$ , kjer velja  $i = (1, 2, \dots, N)$ , je enaka dolžini nosilca  $L$ , torej  $L^i = L$ . Referenčne osi lamel sovpadajo z referenčno osjo celotnega nosilca, ta pa je predpostavljena na spodnjem robu spodnje lamele, kot je razvidno iz Slike 1. Pri tem je lahko posamezna lamela nosilca sestavljen iz več desk z različnimi mehanskimi lastnostmi. Deske so v vzdolžni smeri med seboj povezane z zobatimi spoji. Pri izpeljavi numeričnega modela smo za vsako lamelo predpostavili, da je med posameznimi lamelami dovoljen samo medsebojni zdrs, delaminacija med lamelami pa je preprečena. Posledično pri izpeljavi upoštevamo, da so navpični pomiki vseh lamel med seboj enaki, torej velja  $w^i = w$ . Ravno tako so identični tudi zasuki,  $\varphi^i = \varphi$ , strižne deformacije,  $\gamma^i = \gamma$ , ter specifična ukrivljenost posameznih lamel,  $\kappa^i = \kappa$ . Nosilec je obremenjen s poljubno zunanjo porazdeljeno ali koncentrirano obtežbo,  $\mathcal{P}_{EX}$ , ki deluje na poljubno lamelo. Na lamele deluje tudi kontaktna obtežba  $\mathcal{P}_C$ , ki je neposredno povezana z zdrsom med posameznimi lamelami. Pri izpeljavi numeričnega modela smo upoštevali formulacijo ravninskega nosilca, kot



**Slika 1:** Shematski prikaz lameliranega lepljenega nosilca z zobatimi spoji.

jo je predstavil Reissner [7]. V skladu s predpostavko o majhnih pomikih in zasukih, smo pri izpeljavi upoštevali linearizirane enačbe:

*Kinematične enačbe*

$$\frac{du^i(x)}{dx} - \varepsilon^i(x) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{dw(x)}{dx} + \varphi(x) - \gamma(x) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} - \kappa(x) = 0, \quad (3)$$

kjer so  $u^i$ ,  $w$  in  $\varphi$  vzdolžni pomik lamele  $i$ , navpični pomik in zasuk nosilca. Poleg nastopajo deformacijske količine: vzdolžna deformacija lamele  $i$ ,  $\varepsilon^i(x)$ , strižna deformacija lamel,  $\gamma(x)$ , in specifična ukrivljenost lamel nosilca,  $\kappa(x)$ .

*Ravnotežne enačbe*

$$\frac{dN^i(x)}{dx} + p_X^i(x) + p_{c,X}^{i,j}(x) - p_{c,X}^{i,j-1}(x) = 0, \quad (4)$$

$$\frac{dQ(x)}{dx} + \sum_{i=1}^N p_Z^i(x) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{dM(x)}{dx} - Q(x) + \sum_{i=1}^N m_Y^i(x) = 0, \quad (6)$$

kjer  $N^i$  predstavlja notranjo osno silo v lameli  $i$ ,  $Q$  notranjo strižno silo ter  $M$  notranji upogibni moment. Količini  $p_X^i$  in  $p_Z^i$  predstavljata komponenti zunanje obtežbe na lamelo  $i$ ,  $p_{c,X}^{i,j}$  in  $p_{c,X}^{i,j-1}$  pa komponento  $X$  kontaktne obtežbe, ki delujeta na lamelo  $i$  na kontaktnih površinah  $j$  in  $j-1$ , kjer velja  $j = (1, 2, \dots, N-1)$ .

*Konstitucijske enačbe*

$$N^i(x^i) = N_C^i(\varepsilon^i(x^i), \kappa^i(x^i)) = \int_{\mathcal{A}^i} \sigma^i(x^i, z^i) dA = \int_{\mathcal{A}^i} \sigma^i(D^i(x^i, z^i)) dA, \quad (7)$$

$$Q^i(x^i) = Q_C^i(\gamma^i(x^i)) = \int_{\mathcal{A}^i} \tau^i(x^i, z^i) dA = \int_{\mathcal{A}^i} \tau^i(\gamma^i(x^i, z^i)) dA, \quad (8)$$

$$M^i(x^i) = M_C^i(\varepsilon^i(x^i), \kappa^i(x^i)) = \int_{\mathcal{A}^i} z^i \sigma^i(x^i, z^i) dA = \int_{\mathcal{A}^i} z^i \sigma^i(D^i(x^i, z^i)) dA. \quad (9)$$

Pri tem  $N_C$ ,  $Q_C$  in  $M_C$  predstavljajo konstitucijsko osno in strižno silo ter konstitucijski upogibni moment. Količine so odvisne od deformacij lamel in konstitucijskega zakona materiala, ki ga izbremo poljubno. V primeru linearnega obnašanja materiala, se konstitucijske enačbe lahko bistveno poenostavijo. Izraze lahko najdemo v literaturi, na primer v [5, 8].

*Vežne enačbe*

Deformacija posamezne lamele ni neodvisna od deformacij sosednjih lamel. Kot je razvidno iz ravnotežnih enačb, zaradi togosti stika med lamelami, nanje deluje kontaktna obtežba  $p_{c,X}^{i,j}$  in  $p_{c,X}^{i,j-1}$ , ki je neposredno odvisna od zdrsa med lamelami,  $\Delta_X$ . V skladu s predpostavkami modela, zdrs definiramo kot:

$$\Delta_X^j(x^i) = u^{i+1} - u^i. \quad (10)$$

Kontaktna obtežba je odvisna tudi od togosti stika med lamelami  $K_X$ . Če predpostavimo linearno elastično obnašanje stika med lamelami, je izraz za kontaktno obtežbo preprost:

$$p_{c,X}^{i,j}(x^i) = K_X^j \Delta_X^j(x^i). \quad (11)$$

Zaradi razporeditve napetosti po prerezu upogibno obremenjenega nosilca je natezna sila v spodnjih lamelah običajno kritična za porušitev nosilca. Posledično so tudi zobati spoji v spodnjih lamelah izpostavljeni skoraj enakomernim nateznim napetostim. Zato smo zobate spoje upoštevali kot linearne vzmeti v vodoravni smeri. Silo, ki se med obremenjevanjem pojavi v zobatem spoju, izračunamo z izrazom:

$$N_{FJ} = K_{FJ} \Delta_{FJ}, \quad (12)$$

kjer je  $K_{FJ}$  osna togost zobatega spoja,  $\Delta_{FJ}$  pa raztezek zobatega spoja, ki ga izračunamo kot razliko vodoravnih pomikov na robovih sosednih elementov oziroma stikajočih desk.

### 3 Numerični model

Predstavljene enačbe so linearne diferencialne enačbe prvega reda, ki jih je v splošni obliki težko rešiti. V primeru enostavnejših modelov lepljenih nosilcev lahko ob upoštevanju linearno elastičnega materiala izpeljemo analitične izraze za vseh  $2N + 4$  neznank problema ( $u^i, w, \varphi, N^i, Q$  and  $M$ ). Analitična rešitev za dvoslojni nosilec z zobatima spojema je podrobneje predstavljena v [3]. V primeru kompleksnejših modelov realnih lepljenih nosilcev pa postanejo enačbe težko rešljive. Zato smo izpeljali tudi numerični model lepljenih lameliranih nosilcev z zobatimi spoji. Število lamel in zobatih spojev v posamezni lameli v splošnem ni omejeno. Numerični model je zasnovan na t.i. deformacijskih končnih elementih, ki so se izkazali za zelo učinkovite [6, 8]. Izpeljava enačb temelji na principu virtualnega dela. Osnovni izraz principa virtualnega dela je dopolnjen tako, da so kinematične enačbe (1)–(3) upoštewane kot vezne enačbe. Tako dobimo funkcional, ki je odvisen samo še od deformacijskih količin  $\varepsilon^i, \gamma$  in  $\kappa$  oziroma t.i. modificirano virtualno delo,  $\delta W^{**}$ . Komponente funkcionala modificiranega virtualnega dela, ki nastopajo ob neznanih deformacijskih količinah so linearne diferencialne enačbe, ki jih v splošnem ne znamo rešiti z navadnimi algebrskimi postopki. Zato smo enačbe diskretizirali po Petrov-Galerkinovi metodi. Neznane količine (deformacije) smo aproksimirali z Lagrangeovimi interpolacijskimi polinomi  $L_n$ :

$$\varepsilon^i(x) \approx \sum_{n=1}^{N^e} L_n(x) \varepsilon_n^i, \quad \gamma(x) \approx \sum_{n=1}^{N^\gamma} L_n(x) \gamma_n, \quad \kappa(x) \approx \sum_{n=1}^{N^\kappa} L_n(x) \kappa_n, \quad (13)$$

$$\delta \varepsilon^i(x) \approx \sum_{n=1}^{N^e} L_n(x) \delta \varepsilon_n^i, \quad \delta \gamma(x) \approx \sum_{n=1}^{N^\gamma} L_n(x) \delta \gamma_n, \quad \delta \kappa(x) \approx \sum_{n=1}^{N^\kappa} L_n(x) \delta \kappa_n, \quad (14)$$

kjer  $\varepsilon_n^i, \gamma_n$  in  $\kappa_n$  predstavljajo diskretne vrednosti neznanih količin v izbranih interpolacijskih točkah,  $N^e, N^\gamma, N^\kappa$ , vzdolž končnega elementa. Podobno smo diskretizirali tudi variacije deformacijskih količin  $\delta \varepsilon^i, \delta \gamma$  in  $\delta \kappa$  z enačbo (13). Na ta način pomiki, zasuki ter notranje statične

količine končnega elementa v problemu nastopajo samo z robnimi vrednostmi. Na osnovi predstavljenega sistema enačb (1)–(9) pripravimo tangentno togostno matriko elementa, ki je del tangentne togostne matrike konstrukcije (z ustreznim upoštevanjem povezav med posameznimi končnimi elementi). Pri tem rešujemo Euler Lagrangev sistem diskretnih enačb, ki ga v kompaktni obliki zapišemo kot:

$$f_{(i-1)N^\varepsilon+n} = \int_0^L (N_C^i - R_1^i) L_n(\xi) d\xi = 0; \quad n = (1, 2, \dots, N^\varepsilon), \quad (15)$$

$$f_{NN^\varepsilon+n} = \int_0^L (Q_C - R_2) L_n(\xi) d\xi = 0; \quad n = (1, 2, \dots, N^\gamma), \quad (16)$$

$$f_{NN^\varepsilon+N^\gamma+n} = \int_0^L (M_C - R_3) L_n(\xi) d\xi = 0; \quad n = (1, 2, \dots, N^\kappa), \quad (17)$$

$$f_{NN^\varepsilon+N^\gamma+N^\kappa+i} = u^i(L) - u^i(0) - \sum_{i=1}^{N^\varepsilon} L_n^*(x) \varepsilon_n^i dx = 0, \quad (18)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+1)+N^\gamma+N^\kappa+1} = w(L) - w(0) + \varphi(0) L - \sum_{n=1}^{N^\gamma} L_n^* \gamma_n + \sum_{n=1}^{N^\kappa} L_n^{**} \kappa_n = 0, \quad (19)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+1)+N^\gamma+N^\kappa+2} = \varphi(L) - \varphi(0) - \sum_{i=1}^{N^\kappa} L_n^*(x) \kappa_n^i dx = 0, \quad (20)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+1)+N^\gamma+N^\kappa+2+i} = S_1^i + R_1^i(0) = 0, \quad (21)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+2)+N^\gamma+N^\kappa+3} = S_2 + R_2(0) = 0, \quad (22)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+2)+N^\gamma+N^\kappa+4} = S_3 + R_3(0) = 0, \quad (23)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+2)+N^\gamma+N^\kappa+4+i} = S_4^i - R_1^i(0) - \int_0^L (p_X^i + p_{c,X}^{i,j} - p_{c,X}^{i,j-1}) dx = 0, \quad (24)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+3)+N^\gamma+N^\kappa+5} = S_5 - R_2(0) - \sum_{i=1}^N \int_0^L p_Z^i dx = 0, \quad (25)$$

$$f_{N(N^\varepsilon+3)+N^\gamma+N^\kappa+6} = S_6 - R_3(0) - \int_0^L (R_2 - \sum_{i=1}^N m_Y^i) dx = 0. \quad (26)$$

Integrali lagrangevih polinomov so označeni z  $L_n^*(x)$  in  $L_n^{**}(x)$  in so določeni z enačbami:

$$L_n^*(x) = \int_0^x L_n(\xi) d\xi, \quad L_n^{**}(x) = \int_0^x \left( \int_0^\eta L_n(\xi) d\xi \right) d\eta, \quad (27)$$

kjer je  $x \in [0, L]$ . Na tej točki v problem vpeljemo zobati spoj. Pri izpeljavi smo vpliv zobatega spoja upoštevali kot robni vpliv, ker pa zobati spoj predstavlja povezavo med dvema deskama v lameli ter na ta način lahko začetek ali konec končnega elementa, ga v enačbah lahko upoštevamo šele na nivoju konstrukcije kot dodatno prostostno stopnjo z dodatno enačbo:

$$f_{N(N^\varepsilon+3)+N^\gamma+N^\kappa+6+i} = u_{e_{\text{FJ}}}^i(0) - u_{e_{\text{FJ}}-1}^i(L_{e_{\text{FJ}}-1}) - \Delta_{\text{FJ}}, \quad (28)$$

kjer je  $e_{\text{FJ}} \in \{1, 2, \dots, N_{el}\}$  oznaka elementa z zobatim spojem in  $i \in \{1, 2, \dots, N\}$  je oznaka za lamelo z zobatim spojem.  $N$  in  $N_{el}$  sta skupno število lamel in število končnih elementov.

Diskretne enačbe (24)–(28) zapišemo v matrični obliki in po numerični kondenzaciji zapišemo enačbo konstrukcije:

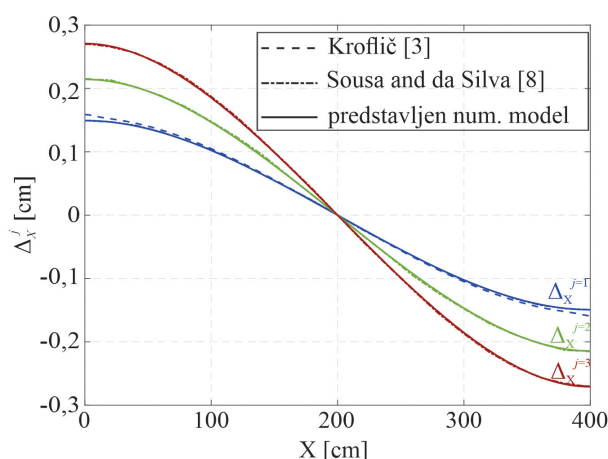
$$\mathbf{g}(\mathbf{u}) - \lambda \mathbf{p} = 0. \quad (29)$$

Vektor  $\mathbf{u}$  predstavlja neznane robne vrednosti pomikov  $u^i(0), w(0), u^i(L), w(L)$  in rotacij  $\varphi(0), \varphi(L)$ , vektor  $\mathbf{p}$  pa vektor zunanje obtežbe z obtežnim faktorjem  $\lambda$ . Sistem enačb (29) smo reševali z Newton-Raphsonovo iterativno metodo.

## 4 Računski primeri

### 4.1 Verifikacija numeričnega modela

Ustreznost numeričnega modela smo preverili s primerjavo z rezultati iz literature. Za primerjavo smo izbrali primer štirislojnega nosilca z lamelami različnih dimenzij. Na Sliki 2 je prikazana primerjava izračunanih zdrsov med lamelami z rezultati iz [4, 9]. Razvidno je, da so razlike med rezultati minimalne in v primeru zgornjih dveh stikov med lamelami ( $j = 2$  in  $j = 3$ ), praktično neopazne.

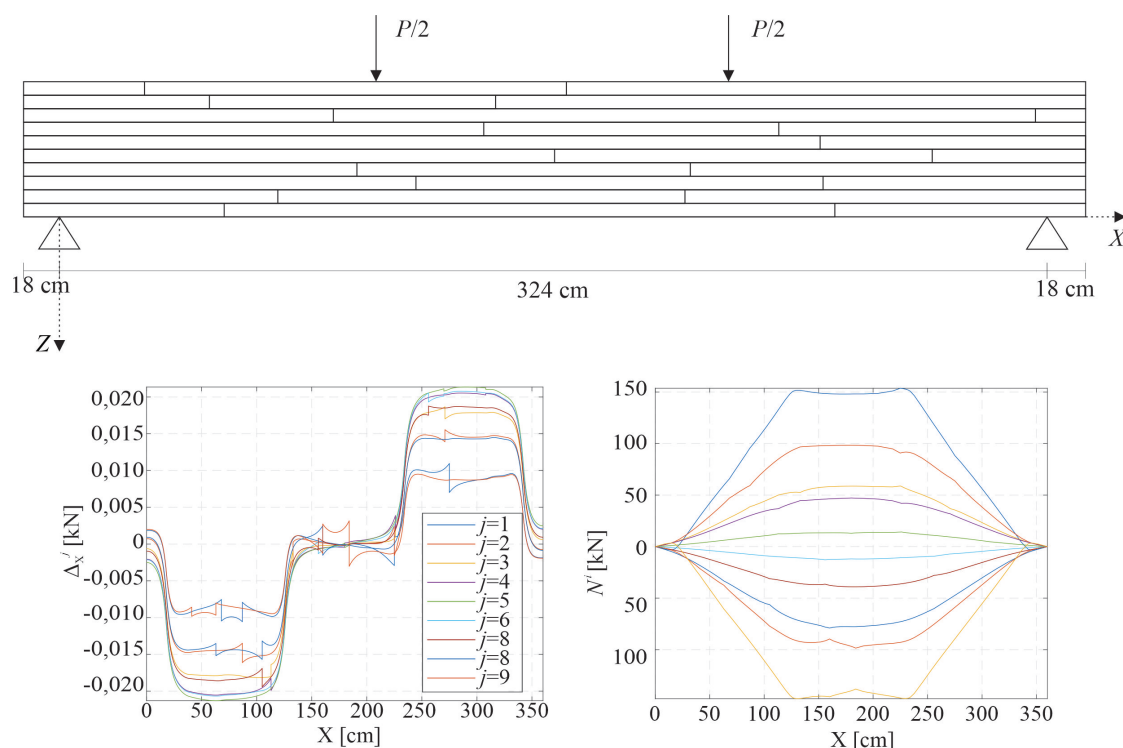


Slika 2: Rezultati verifikacije modela, primerjava z rezultati iz [4] in [9].

### 4.2 Validacija numeričnega modela

Z izdelanim numeričnim modelom lahko izračunamo vse neznane količine vzdolž modela lameliranega lepljenega nosilca. Za ilustracijo obravnavamo primer desetslojnega lepljenega nosilca s po dvema zobatima spojema v vsaki lameli. Ker je bil uporabljen les bukve z znatno višjimi mehanskimi lastnostmi v primerjavi z lesom smreke smo uporabili prilagojen profil zobatih spojev z daljšimi in vitkejšimi zobmi. Nosilec je obremenjen z dvema koncentriranima silama, kot je prikazano na Sliki 3 (zgoraj). Končna skupna sila je bila enaka  $P = 83$  kN. Elastični modul lamel smo določili z merjenjem vzdolžnih vibracij lamel z napravo za strojno razvrščanje lesa STIG [2]. Togost zobatih spojev smo izmerili z nateznimi testi zobatih spojev. Strižni modul nosilca ter togost stika med lamelami smo izmerili med upogibnim testiranjem nosilca.

Z upoštevanjem povprečnega nateznega modula zobatih spojev  $E_{t,FJ} = 1242 \text{ kN/cm}^2$ , strižnega modula  $G = 62 \text{ kN/cm}^2$  in togosti stika med lamelami  $K_X = 156,8 \text{ kN/cm}^2$  na Sliki 3 (spodaj) prikazujemo izbrane količine za posamezne lamele desetslojnega nosilca z zobatimi spoji. Vpliv zobatih spojev je zelo očiten, predvsem na diagramu zdrsov med lamelami  $\Delta_X^j$ ,  $j = (1, 2, \dots, 9)$ , kjer je opazen skok vrednosti zdrsa. Položaj zobatih spojev vpliva tudi na razpored notranjih osnih sil  $N^i$  v lamelah  $i = (1, 2, \dots, 10)$ . Maksimalni navpični pomik na sredini nosilca je bil  $w(L/2) = 6,96 \text{ cm}$ . Če izračunano vrednost primerjamo z izmerjeno vrednostjo navpičnega pomika na sredini nosilca ( $w(L/2) = 6,92 \text{ cm}$ ) vidimo, da je razlika med rezultati zelo majhna.



**Slika 3:** Model desetslojnega nosilca z označenimi položaji zobatih spojev (zgoraj) ter zdrsi med lamelami  $\Delta_X^j$  (spodaj levo) in notranje osne sile  $N^i$  (spodaj desno) izračunane z numeričnim modelom.

Z uporabo pripravljenega modela za numerično analizo lameliranih lepljenih nosilcev z zobatimi spoji smo simulirali obnašanje nosilcev. Pri pripravi vhodnih podatkov smo se oprli na meritve eksperimentalnih raziskav lameliranih lepljenih nosilcev z zobatimi spoji iz bukovega lesa. Za vse količine smo izračunali srednjo vrednost ter standardno deviacijo. S temi podatki je program naključno sestavil lamelirani lepljeni nosilec. Deterministično določena je bila le dolžina nosilca ter položaj zobatih spojev, kot je prikazano na Sliki 3. Tudi širina nosilca je bila enolično določena in sicer  $b = 10 \text{ cm}$ . Ostali vhodni podatki so prikazani v Tabeli 1. Pri konstitucijskem zakonu ( $\sigma - D$  diagram) lesa bukve smo upoštevali nelinearno obnašanje z začetnim

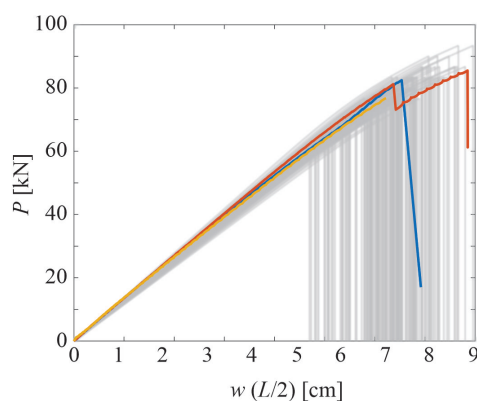


linearno elastičnim odzivom (naklon  $E_t$ ) z zveznim prehodom na končni plato mejne nosilnosti pri  $\sigma = 8 \text{ kN/cm}^2$ .

**Tabela 1:** Tabela stohastično upoštevanih vhodnih podatkov za model lameliranega lepljenega nosilca z desetimi lamelami.

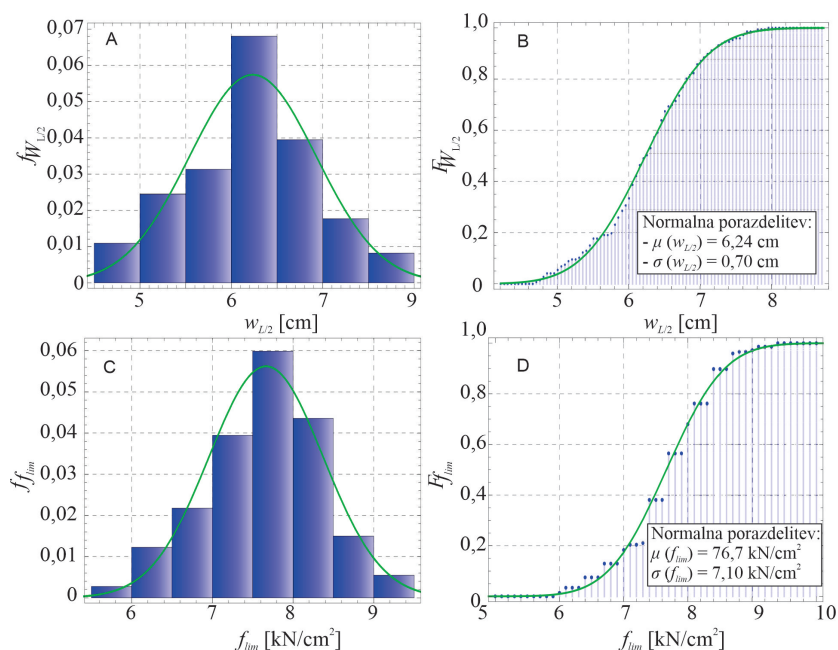
Spremenljivka $X$	Tip porazdelitve	Srednja vrednost $\mu_X$	Koeicent variacije
$E_t$ [ $\text{kN/cm}^2$ ]	Normalna	1878,5	0,10
$E_{t,FI}$ [ $\text{kN/cm}^2$ ]	Lognormalna	1242,0	0,23
$G$ [ $\text{kN/cm}^2$ ]	Lognormalna	81,6	0,36
$K_X$ [ $\text{kN/cm}^2$ ]	Normalna	79,3	0,24
$h^i$ [cm]	Normalna	10,0	0,05

Rezultati 150 simulacij so prikazani na Sliki 4. Poleg rezultatov simulacij so prikazani tudi izmerjeni rezultati štiri-točkovnega upogibnega testa na treh nosilcih iz bukovega lesa (barvne krivulje). Opazimo, da smo z uporabo vhodnih podatkov, določenih na osnovi laboratorijskih preizkusov, uspeli dobro opisati realno obnašanje nosilcev. Na osnovi teh rezultatov lahko zanesljivejše sklepamo o lastnostih modeliranih lepljenih nosilcev. Na Sliki 5 (A in B) sta prikazani gostota porazdelitve ter porazdelitvena funkcija maksimalnega navpičnega pomika na sredini nosilca ob poružitvi. Srednja verjetnost izračunanih pomikov na sredini razpona je znašala 6,24 cm s standardno deviacijo 0,70 cm, kar je nekoliko manjše od povprečne vrednosti pomikov treh izmerjenih nosilcev. Ta je znašala 6,51 cm. S simulacijami smo določili tudi mejno nosilnost  $f_{lim}$  nosilcev ob poružitvi. Gostota porazdelitve in porazdelitvena funkcija sta za mejno nosilnost prikazani na Sliki 5 (C in D). Srednja vrednost izračunanih upogibnih trdnosti nosilcev je znašala 7,67  $\text{kN/cm}^2$  s standardno deviacijo 0,71  $\text{kN/cm}^2$ , kar je približno 5 % manj od izmerjenih upogibnih trdnosti. V Tabeli 2 so za različne vrednosti obtežbe pri-



**Slika 4:** Krivulje sila/pomik za 150 simulacij štiri-točkovnega upogibnega testa z uporabo eksperimentalno določenih vhodnih podatkov.

kazane izračunane verjetnosti porušitve nosilca. Verjetnosti smo izračunali ob predpostavki, da je porušna sila porazdeljena po normalni porazdelitvi ter ob upoštevanju simulirane empirične porazdelitve. Glede na relativno majhno število simulacij ( $N_{sim} = 150$ ) ne moremo zanesljivo sklepati o porazdelitvi porušne sile. Verjetnost porušitve pri sili, ki je enaka srednji vrednosti eksperimentalno izmerjenih porušnih sil treh nosilcev, znaša 79,4 % oziroma 76,2 %, kar je smislen rezultat. Verjetnost, da do porušitve pride pri 60 kN, kar je pri izbrani geometriji nosilca enako nosilnosti 60 kN/cm<sup>2</sup>, pa je relativno majhna.



**Slika 5:** Gostota verjetnosti s histogramom in porazdelitvena funkcija za maksimalni navpični pomik na sredini nosilca ob porušitvi  $w_{L/2}$  (diagrama A in B) ter za porušno napetost  $f_{lim}$  (diagrama C in D).

**Tabela 2:** Verjetnost porušitve desetslojnega nosilca z zobatimi spoji, določena na osnovi stohastične analize z numeričnim modelom in nelinearnim materialnim modelom ob predpostavki normalne porazdelitve in empirične porazdelitve porušne sile nosilca.

Obtežba $P$ [kN]	Verjetnost porušitve (Normalna porazdelitev)	Verjetnost porušitve (Empirična porazdelitev)
60	0,9 %	1,4 %
70	17,3 %	13,6 %
82.5*	79,4 %	76,2 %
90	97,0 %	98,6 %

\*srednja vrednost mejne obtežbe treh izmerjenih nosilcev

## 5 Zaključki

Prikazani numerični model predstavlja uporabno orodje za analizo lameliranih lepljenih nosilcev s poljubnim številom lamel ter poljubnim številom zobatih spojev v lamelah. V modelu je upoštevan vzdolžni zdrs med lamelami ter strižna deformacija lamel. Z numeričnim modelom lahko izračunamo potek deformacijskih in ravnotežnih količin vzdolž nosilca z relativno veliko natančnostjo. Rezultate modela smo preverili z rezultati podobnih modelov iz literature (brez zobatih spojev) in ugotovili dobro ujemanje. S primerjavo z eksperimentalnimi rezultati upogibnih testov lameliranih lepljenih nosilcev iz lesa bukve smo potrdili, da z modelom lahko predvidimo realno obnašanje nosilcev med obremenjevanjem. Model lahko uporabimo tudi za stohastično analizo obnašanja nosilcev. Pri tem smo lahko uporabimo nelinearne materialne parametre. Rezultati simulacij dobro opišejo realno obnašanje nosilcev.

## Literatura

- [1] G. Fink, A. Frangi, and J. Kohler. Bending tests on glt beams having well-known local material properties. *Materials and structures*, 48(11):3571–3584, 2015.
- [2] B. Fortuna, B. Azinović, M. Plos, T. Šuligoj, and G. Turk. Tension strength capacity of finger joined beech lamellas. *European Journal of Wood and Wood Products*, 78(5):985–994, 2020.
- [3] B. Fortuna, G. Turk, and S. Schnabl. Analytical solution of a composite beam with finger joints and incomplete interaction between the layers. *Acta Mechanica*, 232(11):4405–4427, 2021.
- [4] A. Kroflič. *Nelinearna analiza večslojnih kompozitnih konstrukcij*. PhD thesis, University of Ljubljana., Ljubljana, 2012.
- [5] D. Lolić, D. Zupan, and M. Brojan. Delaminacija kompozitnega nosilca z nelinearnim stikom med lamelami. *Srečanje Kuhljevi dnevi 2016*, 2016.
- [6] I. Planinc. *Račun kritičnih točk konstrukcij s kvadratično konvergentnimi direktnimi metodami*. PhD thesis, University of Ljubljana., Ljubljana, 1998.
- [7] E. Reissner. On finite deformations of space-curved beams. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 32(6):734–744, 1981.
- [8] S. Schnabl, M. Saje, G. Turk, and I. Planinc. Locking-free two-layer timoshenko beam element with interlayer slip. *Finite Elements in Analysis and Design*, 43(9):705–714, 2007.
- [9] J. Sousa Jr and A. Silva. Analytical and numerical analysis of multilayered beams with interlayer slip. *Engineering Structures*, 32:1671–1680, 06 2010.



## *Numerično modeliranje razprševanja suspenzije v razpršilnem sušilniku*

Timi Gomboc<sup>1</sup>, Sara Repnik<sup>1</sup>, Matjaž Hriberšek<sup>1</sup>, Jurij Iljaž<sup>1</sup> in Matej Zadavec<sup>1</sup>

### *Numerical modeling of spray generation by spray drying*

**Povzetek.** Sušenje je eno izmed pomembnejših in hkrati najstarejših področij procesne tehnike. Ena izmed zelo uveljavljenih oblik sušenja je razpršilno sušenje, ki je zelo pogosto prisotno v živilski, farmacevtski in kemijski industriji. V danem prispevku obravnavamo karakterizacijo formiranja spreja na razpršilni šobi in izvedbo numerične simulacije z vključenim sekundarnim razpadom spreja. Karakterizacija spreja na šobi je bila izvedena na sistemu Oxfor laser, medtem ko je za izvedbo numeričnih simulacij bil uporabljen programski paket Ansys Fluent. Primerjava rezultatov je pokazala dobro ujemanje med velikostno porazdelitvijo delcev pridobljeno pri eksperimentu in pri numerični simulaciji.

**Abstract.** Drying is one of the most important and at the same time the oldest areas of process technology. One of the most established forms of drying is spray drying, which is very often present in the food, pharmaceutical and chemical industries. In this paper, we discuss the characterization of the spray formation on the spray nozzle and the implementation of numerical simulation with included secondary breakup of the spray. The characterization of the spray on the nozzle was performed on the Oxfor laser system, while the Ansys Fluent software package was used to perform the numerical simulations. A comparison of the results showed a good agreement between the particle size distribution obtained in the experiment and in the numerical simulation.

## 1 Uvod

Sušenje vlažnih snovi predstavlja eno izmed najstarejših in tudi najpogostejših procesnih tehnik, ki se uporablja na širokem področju industrije, kot je na primer prehrabena, kemijska in farmacevtska industrija. Pri sušenju obravnavamo izredno zapletene fizikalne procese, ki obsegajo vezan večfazni prenos toplote, snovi in gibalne količine. Zaradi tega ostaja sušenje še dandanes zelo zahtevno in zanimivo raziskovalno področje, kjer se močno prepletajo praktične

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

izkušnje, eksperimenti in numerično modeliranje.

Pogosto se v prej imenovanih panogah pojavlja oblika razpršilnega sušenje, kjer suspenzije, ki smo jih razvijali v tekoči fazi, spremenimo v trdno fazo, ki omogoča lažjo manipulacijo, skladiščenje in obstojnost. Razprševanje suspenzije v večini poteka na dva načina in sicer, z rotacijskim atomizerjem ali z razpršilno šobo. Sam proces razpršilnega sušenja lahko razdelimo na tri pomembne sklope in sicer, tokovne razmere v sušilniku, proces sušenja in formiranje spreja. Različni avtorji so skozi zgodovino predstavili pomembna spoznanja in dosežke na področju modeliranja razpršilnega sušenja. Avtor Fletcher [2] in sodelavci so v svojem prispevku predstavili ključna spoznanja pri izvedbi tridimenzionalnih izračunov razpršilnega sušenja in interakcije s steno, pri preučevanju stabilnosti toka in odlaganja delcev. Avtor Ramachandran [4] je skupaj s sodelavci objavil pregledni članek, kjer navaja modele posameznih CFD paketov in možnosti njihove uporabe pri simulaciji procesa razpršilnega sušenja. Pregled zajema tudi analizo matematičnih pristopov, uporabljenih v modelih sušenja in turbulentne modele, ki se uporabljajo pri teh simulacijah. Avtor Tavangar [8] s sodelavci je v svoji študiji preučeval dinamično obnašanje kapljic brozge iz premoga in vode med sekundarnim razpadom. V numerični analizi je bila uporabljena sklopljena tehnika, vključno s simulacijo LES in VOF z dinamično prilagodljivo mrežo. Rezultati so pokazali dobre napovedi za sekundarni razpad na osnovi CFD simulacij. Sekundarni razpad delcev je bila tudi tema raziskave, ki jo je predstavil avtor Berni s sodelavci [1]. Problematiko so obravnavali na motorjih z direktnim vbrizgom bencina, kjer ima sekundarni razpad pomembno vlogo pri mešanju zraka in goriva. Najbolj razširjena modela sekundarnega razpada delcev, v primeru obravnave motorjev z notranjim izgorevanjem sta Reitz-Diwakarjev in Kelvin-Helmholtz Rayleigh-Taylorjev model, ki dajeta dobre rezultate. Avtor Schmehl s sodelavci [7] je predstavil rezultate raziskave sekundarnega razpada na primeru dvofaznega toka v mešalni predzgovalni komori, kjer je bila uporabljena Lagrangeva metoda sledenja kapljic. Za razprševanje suspenzije je bila uporabljena tlačno-vrtinčna šoba.

V danem prispevku je obravnavan razpršilni sušilnik, v katerem za razprševanje suspenzije uporabljamo zračno šobo. Poleg zraka na šobi, ki skrbi za razpad delcev se v komoro dovaja sušilni zrak, ki ima funkcijo sušenja kapljic suspenzije. Karakterizacijo šobe in s tem določitev vhodnih parametrov za izvedbo računalniških simulacij smo izvedli s sistemom Oxford laser.

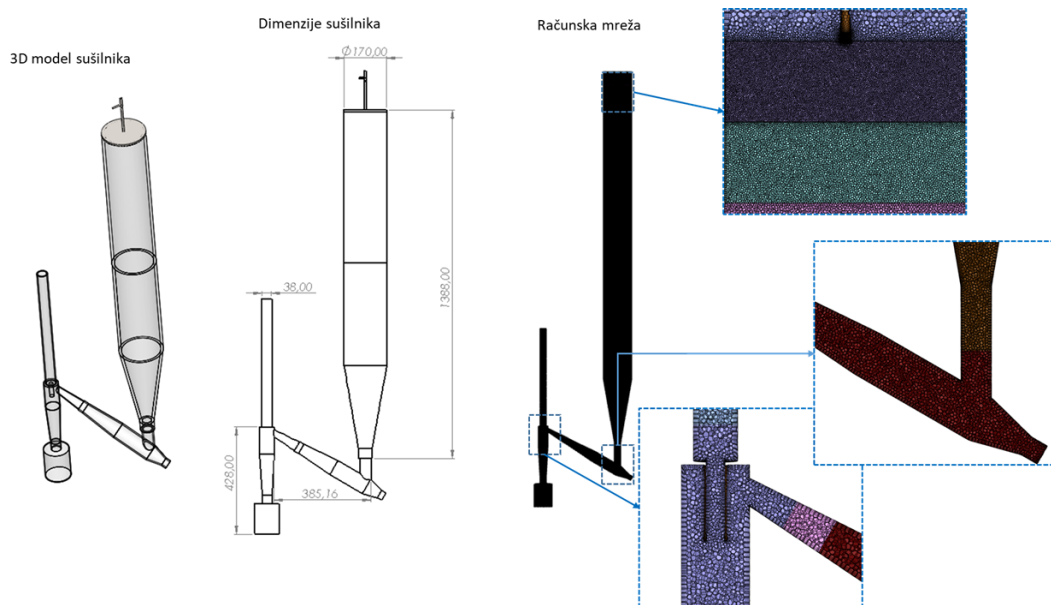
## **2 Numerični model razpršilnega sušilnika**

Numerični model in eksperimentalne analize prikazane v nadaljevanju so bile izvedene na osnovi pilotnega razpršilnega sušilnika podjetja RCPE GmbH Graz in merilne opreme proizvajalca Oxford Laser, za karakterizacijo velikosti delcev v spreju, ki pripada Fakulteti za strojništvo Maribor.

### **2.1 Geometrija in računska mreža**

Razpršilni sušilnik je sestavljen iz osnovne cilindrične komore, v katero na vrhu priteka sušilni plin in suspenzija. Suspenzija se dovaja skozi šobo, kjer poleg toka suspenzije poteka tudi tok formirnega zraka, ki povzroča primarni in sekundarni razpad curka v kapljice. V odvisnosti od pretoka suspenzije in trdnih delcev, ki jih le-ta vsebuje lahko na šobi zamenjajemo dozirno

glavo, kjer imamo na voljo odprtine od  $0,1 \text{ mm}$  do  $1,2 \text{ mm}$ . Osnovna komora razpršilnega sušilnika je visoka  $1380 \text{ mm}$  in se s konusom izteka v prehodni konus, ki je glede na komoro postavlje pod kotom  $60^\circ$ . Na koncu prehodnega konusa je nameščen ciklon, ki skrbi za separacijo suhih delcev iz zraka, ki se izteka na vrhu ciklona. Celotna sušilna komora je izdelana iz stekla debeline  $5 \text{ mm}$ . Model razpršilnega sušilnika smo diskretizirali s  $3.584.333$  poliedrskimi

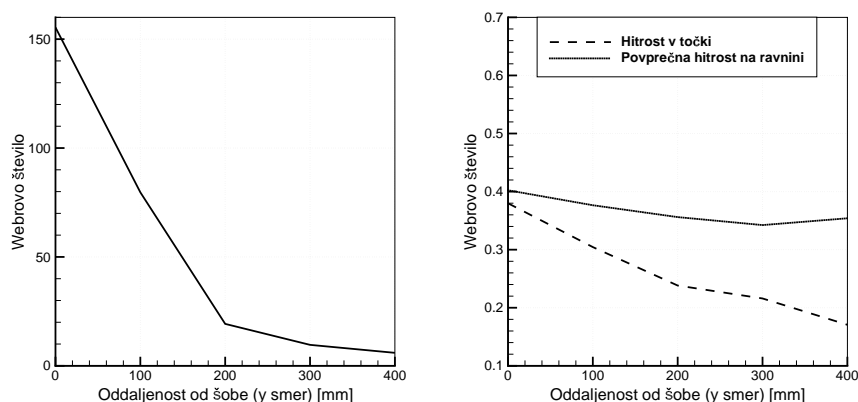


**Slika 1:** Geometrija razpršilnega sušilnika z osnovnimi dimenzijami in računska mreža.

elemnti, ki zajemajo  $18.697.313$  računskih vozlišč. Mreža je bila razdeljena na več segmentov, tako da je območju formacije spreja gostota elementov mreže večja, kot ostalih delih, kot je to prikazano na sliki 1.

## 2.2 Matematično fizikalno ozadje

V primeru razpršilnega sušilnika smo kot sušilni plin uporabljali vroč zrak, ki predstavlja zvezno fazo. Suspenzija je bila v sušilno komoro dovajana na način naključnega formiranja kapljic enake velikosti z enake začetne točke, v kotu razprševanja med  $0^\circ$  in  $30^\circ$  in v krogu  $360^\circ$  okrog točke, kar predstavlja razprševanje v obliki polnega stožca in ustreza profilu uporabljene šobe. Kapljice suspenzije smo obravnavali kot Lagrangeve. Pri formiranju spreja smo uporabili sekundarni model razpada delcev. Modeliranje sekundarnega razpada delcev opisujejo različni modeli. Pri izbiri le-tega si pogosto pomagamo z Weberjevim številom, ki je karakteristično število in kot brezdimenzijska količina opisuje razmerje med deformirajočimi vztrajnostnimi silami in stabilizacijskimi kohezivnimi silami za tekočine, ki se premikajo skozi drugo tekočino (npr. kapljica skozi zrak). Na grafih na sliki 2 je prikazano stanje Weberjevega števila v razpršilnem sušilniku v različnih točkah. Graf na levi strani prikazuje vrednosti Weberjevega števila v centru toka formirnega zraka od šobe do razdalje  $400 \text{ mm}$  od šobe. Graf na desni



**Slika 2:** Vrednosti Weberjevega števila na različnih območjih v delu formacije spreja v razpršilnem sušilniku.

strani pa prikazuje vrednosti Weberjevega števila v točkah, ki so nekoliko zamaknjene od glavne toka formirnega zraka in glede na povprečne hitrosti na ravninah v razpršilnem sušilniku, ki so prikazane na sliki 3. Vidimo lahko, da vrednosti Weberjevega števila nihajo med 155 in 0,18. Na osnovi Weberjevega števila, smo se odločili za uporabo dveh različnih modelov, in sicer Wave modela, ki je primeren za visokohitrostno injkciranje, kjer se domneva, da pri razpadu kapljic prevladuje Kelvin-Helmholtzova nestabilnost ( $We > 100$ ) [5]. Model najbolj ustreza v centralnem curku formirnega zraka, medtem ko je za opis sekundarnega razpada v celotnem območju razpršilnega sušilnika, kjer velja, da je vrednost Weberjevega števila med  $0.18 < We < 155$ , bolj primeren model KHRT, ki združuje učinke Kelvin-Helmholtzove nestabilnosti in TAB modela, ki temelji na Rayleigh-Taylorjevi analogiji.

Pri modelu Wave razpad parcel kapljic izračunamo na osnovi predpostavke, da je polmer novonastalih kapljic sorazmeren valovni dolžini najhitreje rastočega nestabilnega površinskega vala na matični kapljici. Razmerje podamo z enačbo:

$$r = B_0 A \quad (1)$$

kjer je  $B_0$  konstanta, ki je v osnovi enaka 0,61 [6]. Hitrost spremembe polmera kapljice v matični parceli podamo z:

$$\frac{da}{dt} = -\frac{(a-r)}{\tau}, r \leq a. \quad (2)$$

Čas razpada delca  $\tau$  podamo kot:

$$\tau = \frac{3,726 B_1 a}{A \Omega} \quad (3)$$

Časovna konstanta razpada delcev  $B_1$  je v osnovi enaka 1,73, njen razpon pa je možen med 0 in 60 [3]. Vrednost maksimalne rasti  $\Omega$  in pripadajoči dolžino rastočega vala  $A$  določimo iz

Reity-ove odvisnosti:

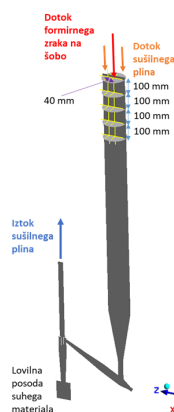
$$\frac{A}{a} = 9,02 \frac{(1 + 0,45Oh^{0,5}) (1 + 0,4Ta^{0,7})}{(1 + 0,87We_2^{1,67})} \quad (4)$$

$$\Omega \sqrt{\frac{\rho_1 a^3}{\sigma}} = \frac{0,34 + 0,38We_2^{1,5}}{(1 + Oh)(1 + 1,4Ta^{0,6})} \quad (5)$$

kjer Ohnesorgevo število izračunamo kot  $Oh = \sqrt{We_1}/Re_1$  in Taylorjevo število pa kot  $Ta = Oh\sqrt{We_2}$ . Weberjevo število je definirano kot  $We_1 = \rho_1 U^2 a / \sigma$  in  $We_2 = \rho_2 U^2 a / \sigma$  ter Reynoldsovo število kot  $Re_1 = Ua/v_1$

### 2.3 Robni pogoji

Robni pogoji za izvedbo numeričnih simulacij so bili enaki, kot so bili robni pogoji pri eksperimentu in so prikazani v tabeli na sliki 4. V primeru trka delca s steno sušilnika je bil predpisan robni pogoj odboja delca, pod enakim kotom, kot je bil kot prileta v steno. Za namene prispevka smo uporabili eksperimentalne vrednosti meritve številka 1 v tabeli na sliki 4.



**Slika 3:** Prikaz robnih pogojev na razpršilnem sušilniku ter ravnin in točk za prikaz rezultatov.

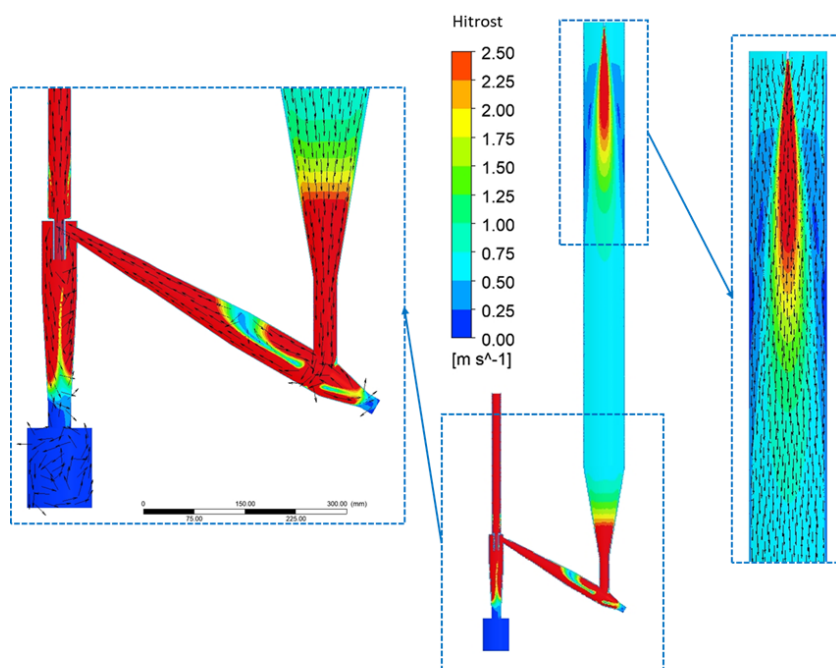
Meritev	Šoba [mm]	T <sub>in</sub> [°C]	Zrak sušilnik [m <sup>3</sup> /min]	T <sub>out</sub> [°C]	Pretok suspenzije [g/min]	Zrak šoba [l/min]	T zrak iztok [°C]	Plak ciklon [mBar]
1	1.2	97.50 ± 0.23	0.65 ± 0.02	67.29 ± 0.77	1.57 ± 0.10	19.22 ± 0.08 (0.59 ± 0.01 bar)	57.10 ± 0.68	55.55 ± 1.06
2	1.2	117.46 ± 0.87	0.46 ± 0.01	60.71 ± 1.12	1.88 ± 0.08	19.57 ± 0.07 (0.59 ± 0.00 bar)	59.41 ± 1.01	59.41 ± 1.02
3	1.2	117.27 ± 0.50	0.48 ± 0.01	61.44 ± 1.22	1.89 ± 0.26	19.22 ± 0.07 (0.59 ± 0.00 bar)	65.51 ± 1.35	60.50 ± 1.11
4	1.2	137.96 ± 0.24	0.23 ± 0.01	40.20 ± 0.48	1.82 ± 0.14	19.24 ± 0.06 (0.61 ± 0.01 bar)	55.11 ± 0.51	55.58 ± 1.04
5	1.2	136.26 ± 0.37	0.57 ± 0.01	85.27 ± 1.65	1.80 ± 0.09	19.00 ± 0.06 (0.59 ± 0.00 bar)	59.97 ± 1.60	57.73 ± 0.64
6	1.2	98.78 ± 0.19	0.22 ± 0.02	34.93 ± 1.12	1.60 ± 0.20	19.00 ± 0.09 (0.59 ± 0.00 bar)	37.03 ± 1.28	52.99 ± 2.00

**Slika 4:** Procesni pogoji in vrednosti merjenih parametrov pri izvajanju eksperimenta.



### 3 Rezultati

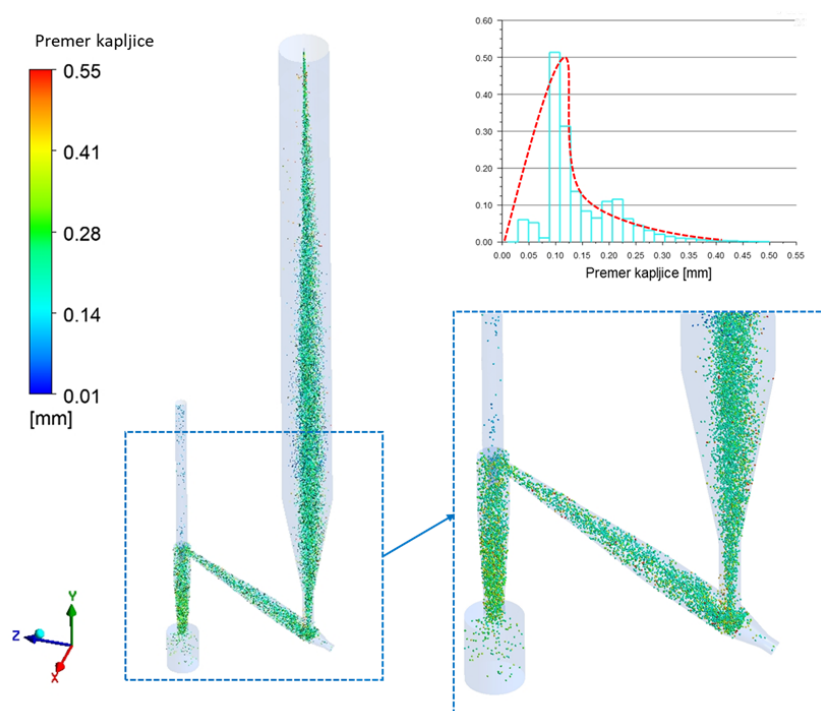
Na vstopu v sušilnik, sta bila predpisana dva masna pretoka zraka in sicer pretok formirnega zraka na šobi, katerega pretok znaša  $19,22 \text{ l/min}$  in sušilnega zraka v komoro, ki se steka preko celotne zgornje površine sušilnega stolpa in znaša  $0,65 \text{ m}^3/\text{min}$ . Na izstopu iz ciklona je predpisan tlak  $0 \text{ bar}$ . Za izvedbo numerične simulacije je bil uporabljen  $k - \epsilon$  turbulentni model. Na osnovi predpisanih robnih pogojev se v sušilniku razvije tokovno polje, ki je prikazano na sliki 5. Vidimo lahko, da formirni zrak na šobi povzroči lokalno območje



**Slika 5:** Hitrostno polje v razpršilnem sušilniku s prikazom vektorjev na območju formiranja spreja in prehodnega konusa ter ciklona.

povečane hitrosti zraka v zgornjem delu sušilnega stolpa kjer prihaja do formiranja spreja. Do povečanega vtrčinjenja zraka prihaja na izhodu iz sušilnega stolpa in na prehodu v prehodni konus, saj prihaja do ostre spremembe sredi toka. Do podobnega stanja pride v ciklonu, kjer pa je zaradi tega dosežena funkcija ločevanja suhih delcev iz toka sušilnega plina. Le-ti zaradi svoje mase končajo na stenah ciklina in padejo v lovilno posodo. Le redki osušeni delci, ki predstavljajo najmanjše delce glede na velikostno razporeditev, uspejo ciklon zapustiti skupaj s sušilnim plinom.

Nastanek spreja in potovanje delcev skozi sušilnik nam prikazuje slika 6. V začetni fazi nastajanja spreja se tvorijo večje kapljice, ki zapuščajo območje šobe. Kot izhaja iz prikaza tokovnega polja, se novo nastale kapljice znajdejo na področju različnih hitrosti znotraj sušilnika. Pri tem na njih delujejo različno velike sile in posledično prihaja do razpada oziroma tvorjenja manjših



**Slika 6:** Prikaz delcev v razpršilnem sušilniku z velikostno razporeditvijo delcev.

kapljic iz začetnih velikih kapljic. Za kalibracijo numeričnega modela so bile opravljene meritve šob na sistemu Oxford laser, ki omogoča merjenje velikosti kapljic, delcev in mehurčkov, karakterizacijo oblike spreja prek kvantifikacije vzorca spreja in geometrije spreja. Porazdelitev delcev, ki nastanejo pri razprševanju, ima vrh pri kapljicah velikosti  $0.1 \text{ mm}$ , kar je prikazano na grafu na sliki 6. Modri histogram prikazuje velikostno porazdelitev numerične simulacije, medtem ko rdeča črta prikazuje stanje eksperimentalne meritve na šobi z nazivno velikostjo  $1.2 \text{ mm}$ .

#### 4 Zaključek

Modeliranje procesa razpršilnega sušenja je kompleksen proces. Za izračun pravilne kinetike sušenja delcev in posledično določitev časov, ki so potrebni za uspešno sušenje kapljic suspenzije, ki jo dovajamo v sušilno komoro, je potrebno doseči natančno porazdelitev velikostnih razredov delcev, ki prihajajo iz šobe. Merilni sistem Oxford laser nam omogoča meritve za karakterizacijo spreja, na osnovi česar pridemo do nujnih vhodnih podatkov za numerične simulacije. Tako smo dosegli primerljivo podazdelitev delcev med eksperimentom in simulacijo. V nadaljem delu bomo numerični model nadgradili z dvostopenjskim modelom sušenja delcev, ki poleg sušenja površinske vlage zajema še sušenje notranjost delca.

## Literatura

- [1] F. Berni, S. Sparacino, M. Riccardi, A. Cavicchi, L. Postrioti, M. Borghi, and S. Fontanesi. A zonal secondary break-up model for 3d-cfd simulations of gdi sprays. *Fuel*, 309:122064, 2022.
- [2] D. Fletcher, B. Guo, D. Harvie, T. Langrish, J. Nijdam, and J. Williams. What is important in the simulation of spray dryer performance and how do current cfd models perform? *Applied mathematical modelling*, 30(11):1281–1292, 2006.
- [3] A. B. Liu, D. Mather, and R. D. Reitz. Modeling the effects of drop drag and breakup on fuel sprays. *SAE Transactions*, pages 83–95, 1993.
- [4] R. P. Ramachandran, M. Akbarzadeh, J. Paliwal, and S. Cenkowski. Computational fluid dynamics in drying process modelling—a technical review. *Food and bioprocess technology*, 11(2):271–292, 2018.
- [5] R. D. Reitz. Mechanism of breakup of round liquid jets. *Encyclopedia of fluid mechanics*, 10, 1986.
- [6] R. D. Reitz. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomization Spray Technology*, 3(4):309–337, 1987.
- [7] R. Schmehl, G. Maier, and S. Wittig. Cfd analysis of fuel atomization, secondary droplet breakup and spray dispersion in the premix duct of a lpp combustor. In *ICLASS 2000: 8th International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Pasadena, CA, USA, 16-20 July 2000*. ILASS, 2000.
- [8] S. Tavangar, S. H. Hashemabadi, and A. Saberimoghadam. Cfd simulation for secondary breakup of coal–water slurry drops using openfoam. *Fuel Processing Technology*, 132:153–163, 2015.



## *Numerično reševanje Fourierjevega in ne-Fourierjevega prevoda toplote v biološkemu tkivu*

Ivan Dominik Horvat<sup>1</sup>, Jurij Iljaž<sup>1</sup>

### *Numerical modeling of Fourier and non-Fourier bio-heat transfer*

**Povzetek.** Infrardeča dinamična termografija je klinično dokazana kot obetavna metoda za zgodnjo diagnostiko kožnega raka ter ima določene prednosti pred drugimi diagnostičnimi metodami. Numerično modeliranje prenosa toplote v biološkem tkivu lahko pomembno prispeva pri nadaljnjem razvoju dinamične termografije z izboljšanjem procesnih parametrov in določitvijo termofizičnih lastnosti tkiva na podlagi meritev. V tem prispevku je prikazan algoritem na osnovi podobmočne metode robnih elementov za numerično simulacijo prenosa toplote v biološkemu tkivu z upoštevanjem Fourierjevega in ne-Fourierjevega prevoda toplote. Algoritem je bil pri tem prav tako testiran na različnih primerih izvedenih iz strani drugih avtorjev, kot validacija. Kot je razvidno iz rezultatov in primerjave modelov lahko zaključimo da razviti algoritem uspešno reši tako Fourierjev kot ne-Fourierjev prevod toplote v biološkem tkivu pri čemer je obstaja velika razlika med njima, ki pa je odvisna od uporabljenega relaksacijskega časa.

**Abstract.** Infrared dynamic thermography is clinically proven to be a promising method for early diagnosis of skin cancer and has certain advantages over other diagnostic methods. Numerical modeling of heat transfer in biological tissue can make an important contribution to the further development of dynamic thermography by improving process parameters and determining the thermophysical properties of tissue based on measurements. In this paper, an algorithm based on the subdomain boundary element method for numerical simulation of heat transfer in biological tissue using Fourier and non-Fourier heat transfer is presented. The algorithm was also tested on various cases performed by other authors for validation. As can be seen from the results and comparison of models, we can conclude that the developed algorithm successfully solves both Fourier and non-Fourier heat transfer in biological tissue and there is a significant difference between them, which depends on the relaxation time used.

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

## 1 Uvod

Infrardeča (IR) dinamična termografija je klinično dokazana kot obetavna metoda za zgodnjo diagnostiko kožnega raka [6]. Infrardeča kamera meri toplotno sevanje, ki ga oddaja opazovana površina, po navadi koža, in se na podlagi moči sevanja ter emisivnosti površine lahko določi temperatura na površini. Ker metoda meri temperaturo površine brezkontaktno, in sicer na celotni površini, ima določene prednosti pred ostalimi kontaktnimi merilnimi tehnikami, kot so termočleni, ki morajo biti v stiku z opazovanim materialom ali medijem in lahko pri tem merijo temperaturo le v eni točki.

Numerično modeliranje prenosa toplote v biološkem tkivu lahko pomembno prispeva pri nadaljnjem razvoju dinamične termografije z izboljšanjem procesnih parametrov ali določevanjem termofizičnih lastnosti tako zdravega kot obolelega tkiva na podlagi meritve oziroma temperaturnega kontrasta. Pri modeliranju se najpogosteje uporablja Pennesov model prenosa toplote, ki predpostavlja, da izmenjava energije med krvnimi žilami in okoliškim tkivom poteka predvsem na kapilarnem nivoju, kjer je hitrost krvi zelo nizka, medfazna površina za prenos toplote pa velika. Pri tem Pennesov model upošteva Fourierjev model prevoda. Zaradi preprostosti implementacije in analize se Pennesov model široko uporablja pri modeliranju prenosa toplote v biološkemu tkivu. Vendar obstajajo nekatere pomanjkljivosti modela, saj predvideva neskončno hitrost širjenja toplote.

Drugi avtorji ugotavljajo da se toplota v biološkem tkivu širi s končno hitrostjo še zlasti v tkivu z nehomogeno notranjo strukturo [19]. Do takšnega pojava pri prevodu toplote pride tudi v primerih visoke spremembe temperaturnega gradienta v relativno kratkem času, zaradi česar je potrebno modelirati prevod toplote z ne-Fourierjevim modelom. Valovno obnašanje pri prenosu toplote v biološkemu tkivu sta hkrati raziskovala Cattaneo [2] in Vernotte [18] pri kateremu je dodan vpliv relaksacijskega časa toplotnega toka. Kar nekaj avtorjev je naredilo eksperimentalno validacijo ne-Fourierjevega prevoda toplote oziroma hiperboličnega prenosa toplote [8, 11, 15, 16, 7, 1]. Obstaja časovna razlika med hitrostjo širjenja toplotne motnje med navadnim Pennesovim – Fourierjevim modelom in Cattaneo-Vernotteovim – ne-Fourierjevim modelom prenosa. Dvofazni hiperbolični model prenosa toplote je raziskoval Tzou [17] v kateremu je dodan vpliv relaksacijskega časa temperaturnega gradienta hkrati z relaksacijskim časom toplotnega toka. Choudhuri [3] je predstavil trifazni hiperbolični model prenosa toplote v kateremu se upošteva tudi vpliv relaksacijskega časa zaradi gradienta toplotnega premika.

V tem prispevku je prikazan razviti numerični model prenosa toplote v biološkemu tkivu na osnovi podobmočne metode robnih elementov, in sicer za reševanje klasičnega Pennesovega in nadgrajenega Cattaneo-Vernotteovega modela prenosa toplote. Algoritem je bil pri tem testiran na različnih primerih drugih avtorjev.

## 2 Numerični model prenosa toplote

Prvi model prenosa toplote v biološkemu tkivu je leta 1948 predstavil ameriški zdravnik dr. Pennes [12]. Parabolična Pennesova enačba vsebuje volumske notranje izvore toplote, ki so povezani s perfuzijskim pretokom krvi in metabolizmom. Pri tem predpostavlja, da območje oskrbuje veliko število kapilarnih krvnih žilic, ki so enakomerno razporejene v vse smeri. V zadnjem času se je pojavilo stališče, da ob upoštevanju specifične notranje strukture tkiva enačbe

ki vsebujejo časovni zamik med toplotnim tokom in temperaturnim gradientom nekoliko boljše opišejo dejansko obnašanje prenosa toplote [8, 11, 15].

## 2.1 Pennesov model prenosa toplote

Osnovni model prenosa toplote se imenuje Pennesov model, ki temelji na Fourierjevi teoriji, ki predpostavlja neskončno hitrost prevoda toplote [12]:

$$\rho_t c_t \frac{\partial T_t}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (k_t \vec{\nabla} T_t) + \rho_b \omega_b c_b (T_b - T_t) + q_m. \quad (1)$$

pri čemer je  $\rho_t$  efektivna gostota tkiva,  $c_t$  specifična toplota tkiva,  $T_t$  temperatura tkiva,  $k_t$  koeficient toplotne prevodnosti tkiva,  $\rho_b$  efektivna gostota krvi,  $\omega_b$  perfuzijski pretok krvi skozi tkivo,  $c_b$  specifična toplota krvi,  $T_b$  arterijska temperatura krvi ter je  $q_m$  metabolični izvor toplote.

Pennesov model vsebuje volumnske notranje izvore toplote, ki izhajajo iz perfuzijskega pretoka krvi in procesov, ki so povezani s presnovo, oziroma dodatni toplotni prispevek  $Q$  ki se lahko zapiše kot:

$$Q = \rho_b \omega_b c_b (T_b - T_t) + q_m. \quad (2)$$

## 2.2 Cattaneo-Vernotte model prenosa toplote

Vodilna enačba je hiperbolična in opisuje valovno obnašanje prenosa toplote. Cattaneo [2] in Vernotte [18] sta podala izboljšani model prevoda toplote, pri katerem je upoštevan relaksacijski čas  $\tau_q$  med toplotnim tokom in temperaturnim gradientom (CV model), in sicer se model zapiše v obliki:

$$\rho_t c_t \left[ \tau_q \frac{\partial^2 T_t}{\partial t^2} + \frac{\partial T_t}{\partial t} \right] = \vec{\nabla} \cdot (k_t \vec{\nabla} T_t) + Q + \tau_q \frac{\partial Q}{\partial t}. \quad (3)$$

Pri vrednosti relaksacijskega časa  $\tau_q = 0$  se Cattaneo-Vernotte model reducira na Pennesov model prenosa toplote, saj odpadejo členi ki so pomnoženi z relaksacijskim časom  $\tau_q$ .

## 3 Podobmočna metoda robnih elementov

Podobmočna metoda robnih elementov (PMRE) je numerična metoda za reševanje parcialnih diferencialnih enačb, pri kateri se razdeli celotno območje reševanja na več podobmočij s čimer je sistemska matrika bolj prazna, kar močno pohitri reševanja sistema linearnih enačb in s tem numerično simulacijo [14, 13, 6]. Pri diskretizaciji vodilne enačbe prenosa toplote smo le-to obravnavali v obliki Poissonove enačbe za polje temperatur  $T$ , in sicer kot:

$$L[T(\vec{s})] + b(\vec{s}) = \frac{\partial^2 T(\vec{s})}{\partial x_i(\vec{s}) \partial x_i(\vec{s})} + b(\vec{s}) = 0. \quad (4)$$

pri čemer sta  $\vec{S}$  in  $\vec{s}$  vektorja poljubnih točk na robu ter znotraj območja  $\Omega_s$ . Integralska oblika Poissonove enačbe z upoštevanjem Gaussovega divergenčnega teorema se zapiše kot:

$$c(\vec{\xi})T(\vec{\xi}) + \int_{\Gamma} T(\vec{S})q^*(\xi, \vec{S}) d\Gamma = \int_{\Gamma} q(\vec{S})T^*(\xi, \vec{S}) d\Gamma + \int_{\Omega_s} b(\vec{s})T^*(\vec{\xi}, \vec{s}) d\Omega_s. \quad (5)$$

pri čemer je  $\xi$  kolokacijski vektor izvorne točke,  $c$  geometrijski faktor,  $T^*$  osnovna rešitev Laplaceove enačbe,  $q^*$  je normalni odvod osnovne rešitve na robu in  $b(\vec{s})$  je nehomogen izvor. Osnovna rešitev ter normalni odvod osnovne rešitve za 2D Laplaceovo enačbo sta:

$$T^*(\vec{\xi}, \vec{s}) = -\frac{1}{2\pi} \cdot \ln \left[ \left\| \vec{d}(\vec{\xi}, \vec{s}) \right\| \right], \quad q^*(\vec{\xi}, \vec{s}) = \frac{\vec{n} \cdot \vec{d}(\vec{\xi}, \vec{s})}{2\pi \left\| \vec{d}(\vec{\xi}, \vec{s}) \right\|}. \quad (6)$$

pri čemer je  $\vec{d}(\vec{\xi}, \vec{s})$  vektor razdalje izvorne točke ter poljubne točke znotraj domene. Za izhodiščno enačbo smo izbrali hiperbolično Cattaneo-Vernotte (CV) enačba prevoda toplote (3).

Za časovni odvod temperature  $T$  je privzeta shema končnih razlik:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{3T(\vec{s}, t^f) - 4T(\vec{s}, t^{f-1}) + T(\vec{s}, t^{f-2})}{2\Delta t} = T_{\Delta}, \quad \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \approx \frac{T(\vec{s}, t^f) - 2T(\vec{s}, t^{f-1}) + T(\vec{s}, t^{f-2})}{(\Delta t)^2} = T_{\Delta^2}. \quad (7)$$

pri čemer indeks  $f$  označuje časovni korak in  $\Delta t$  časovni korak.

Pri tem je nehomogeni del CV modela:

$$b(\vec{s}) = \left( c_t \rho_t + \tau_q \omega_b c_b \rho_b \right) T_{\Delta} + c_t \rho_t \tau_q T_{\Delta^2} - \rho_b \omega_b c_b (T_b - T_t) - q_m. \quad (8)$$

Z nastavitvijo relaksacijskega časa na 0, CV model se dejansko reducira na Pennesov model. Končna matrična oblika CV modela pri podobmočni metodi robnih elementov je:

$$[H_e]\{T\} + [S_e]\{b\} = [G_e]\{q\} \quad \rightarrow \quad [A]\{x\} = \{b\}, \quad (9)$$

$$[H_e]\{T_t^f\} + [S_e]\left\{ \left( c_t \rho_t + \tau_q \omega_b c_b \rho_b \right) T_{\Delta} + c_t \rho_t \tau_q T_{\Delta^2} - \rho_b \omega_b c_b (T_b - T_t) - q_m \right\} = [G_e]\{q^f\}. \quad (10)$$

pri čemer so  $[H]$ ,  $[S]$  ter  $[G]$  vplivne matrike pridobljene po integraciji po robu in območju. Uporabljeni so linearni elementi ter kvadratna interpolacija za temperaturo, konstantni elementi za normalni odvod temperature.

#### 4 Validacija numeričnega modela prenosa toplote v biološkemu tkivu

Čeprav v področju ne-Fourierjevega prevoda toplote v nehomogenih materialih obstaja relativno malo število razvitih numeričnih modelov ter eksperimentalnih raziskav, je lastno razvit 2D

numerični model primerjan z delom avtorja Majchrzak et al. [10] ter Ciesielski et al. [4]. Pri tem je bila narejena je analiza numerične natančnosti z analizo vpliva računske mreže in časovnega koraka, in sicer so vrednosti podane pri vsakem primeru.

#### 4.1 Prvi primer

V delu [10] so podani naslednji robni in začetni pogoji skupaj s fizikalnimi lastnosti:

- 1D
- Plast tkiva debeline  $L = 10$  mm
- Fizikalne lastnosti:  
 $k_t = 0,5$  W/(mK),  $c_t = 4,2$  MJ/(m<sup>3</sup>K),  $c_b = 3,9962$  MJ/(m<sup>3</sup>K),  $\omega_b = 0,002$  1/s,  $T_b = 37$  °C,  
 $Q_m = 420$  W/m<sup>3</sup>,  $\tau_q = 35$  s
- Začetni pogoj:  $T_{i0} = 37$  °C, robna pogoja: 
$$\begin{cases} T_{t1}(t) = 37 + 0,25t, & x = 0 \\ T_{t2} = 37^\circ\text{C}, & x = L \end{cases}$$

Uporabljeno je 64 časovnih korakov, z velikostjo časovnega koraka  $\Delta t = 0,5$ , s velikostjo elementov  $\Delta x = 0,2$  mm. Modeliran je 1D prevod toplote, kot je to narejeno v članku.

#### 4.2 Drugi primer

V delu [4] so podani naslednji robni in začetni pogoji ter so podane naslednje fizikalne lastnosti:

- 1D
- Plast tkiva debeline  $L = 15$  mm
- Fizikalne lastnosti:  
 $k_t = 0,42$  W/(mK),  $c_t = 3768 \cdot 1085$  J/(m<sup>3</sup>K),  $c_b = 3650 \cdot 1069$  J/(m<sup>3</sup>K),  $\omega_b = 0,53 \cdot 10^{-3}$  1/s,  $T_b = 37$  °C,  $Q_m = 684$  W/m<sup>3</sup>,  $\tau_q = 2$  s,  $q_{b1} = 1250$  W/m<sup>2</sup>,  $q_{b2} = 0$  W/m<sup>2</sup>
- Začetni pogoj:  $T_{i0} = 35,7$  °C, robna pogoja: 
$$\begin{cases} q_{b1}, & x = 0 \\ q_{b2}, & x = L \end{cases}$$

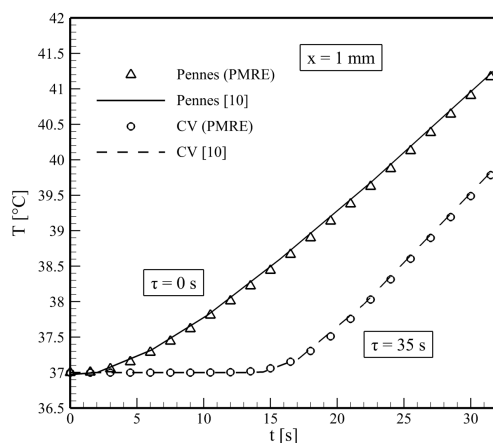
Uporabljeno je bilo 60 časovnih korakov, z velikostjo časovnega koraka  $\Delta t = 0,5$  s, z velikostjo elementov  $\Delta x = 0,2$  mm. Modeliran je 1D prevod toplote, kot je narejeno v članku, in sicer na 2D geometrijo smo v prečni smeri predpisali adiabatni robni pogoj.

### 5 Rezultati

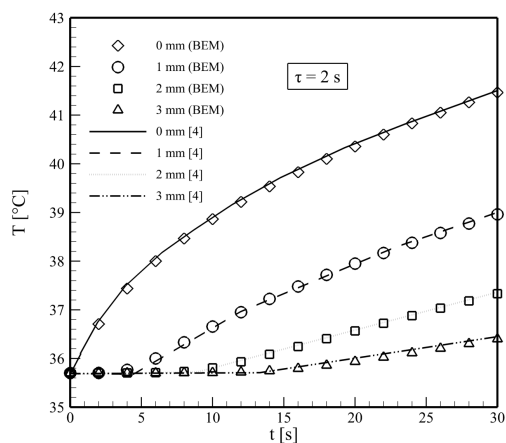
V prvem primeru je primerjan Pennesov in Cattaneo-Vernotte model z vrednostjo relaksacijskega časa  $\tau_q = 35$  s na razdalji  $x = 1$  mm s spremenljivim robnim pogojem, kar je razvidno iz slike 1. V drugem primeru so podane krivulje spremembe temperature po času za relaksacijski



čas  $\tau_q = 2$  s za razdalje  $x = 0$  mm, 1 mm, 2 mm ter 3 mm, kot je to razvidno iz slike 2. V obeh primerih je vidno ujemanje krivulj s predlaganim razvitim algoritmom prav tako pa je razvidna časovna zakasnitev med paraboličnim in hiperboličnim modelom prenosa toplote. Takšno obnašanje je opaženo v [8, 11, 15, 16, 7, 1].



Slika 1: Temperatura v odvisnosti od časa za Pennesov in CV model za prvi primer



Slika 2: Temperatura v odvisnosti od časa za CV model na različnih višinah, in sicer za drugi primer

## 6 Zaključek

Iz navedenega se lahko sklepa, da lastno razviti algoritem za reševanje hiperboličnega prenosa toplote s pomočjo podobnočne metode robnih elementov ustrezno opiše obnašanje prenosa toplote v biološkemu oz. nehomogenemu tkivu. Področje ne-Fourierjevega prenosa toplote pa je še vedno premalo raziskano in je potrebno izvesti zadostno število pravilno izvedenih eksperimentov na podlagi katerih bi lahko izvedli validacijo ustreznosti posameznega modela. Pomembne so nadaljnje raziskave vrednosti in vpliva relaksacijskega časa na dejanskih tkivih ter preostaja ponovitev eksperimentov kot je [11].

V delih [9, 15, 5] je bolj podrobno opisana merodajnost naštetih eksperimentalnih validacij. Avtorji opisujejo določene pomanjkljivosti pri izvedbi samih eksperimentov, kot je nepoznavanje sodobnih metod ocenjevanja procesnih parametrov. Kot pomanjkljivosti so opisane neobstoječe ali pomanjkljive analize napak eksperimentalnih meritev, nepotrjeni eksperimentalni robni pogoji in podobno. V delu [5] so zaključki avtorjev nekje vmes. Avtorji priznavajo valovno obnašanje prevoda toplote v nehomogenih materialih, vendar ne v obsegu, kot so avtorji v [11] in [8] ugotovili v svojih raziskavah.

Pomembne so nadaljnje raziskave vrednosti in vpliva relaksacijskega časa na dejanskih tkivih ter preostaja ponovitev eksperimentov kot je [11].

## 7 Literatura

- [1] W. Andrä, C. d'Ambly, R. Hergt, I. Hilger, and W. Kaiser. Temperature distribution as function of time around a small spherical heat source of local magnetic hyperthermia. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 194(1):197–203, 1999.
- [2] C. Cattaneo. Sur une Forme de l'equation de la Chaleur Eliminant le Paradoxe d'une Propagation Instantanee'. *Compt. Rendu*, 247:431–433, 1958.
- [3] S. Choudhuri. On A Thermoelastic Three-Phase-Lag Model. *Journal of Thermal Stresses*, 30:231–238, 03 2007.
- [4] M. Ciesielski, M. Duda, and B. Mochnacki. Comparison of bio-heat transfer numerical models based on the Pennes and Cattaneo-Vernotte equations. *Journal of Applied Mathematics and Computational Mechanics*, 15:33–38, 12 2016.
- [5] H. Herwig and K. Beckert. Experimental evidence about the controversy concerning Fourier or non-Fourier heat conduction in materials with a nonhomogeneous inner structure. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, 36(5):387 – 392, 2000. Cited by: 64.
- [6] J. Iljaž, L. Wrobel, M. Hriberšek, and J. Marn. Numerical modelling of skin tumour tissue with temperature-dependent properties for dynamic thermography. *Computers in Biology and Medicine*, 112:103367, 2019.
- [7] M. Jaunich, S. Raje, K. Kim, K. Mitra, and Z. Guo. Bio-heat transfer analysis during short pulse laser irradiation of tissues. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(23):5511–5521, 2008. Biomedical-Related Special Issue.

- [8] W. Kaminski. Hyperbolic Heat Conduction Equation for Materials With a Nonhomogeneous Inner Structure. *Journal of Heat Transfer*, 112(3):555–560, 08 1990.
- [9] D. Maillet. A review of the models using the Cattaneo and Vernotte hyperbolic heat equation and their experimental validation. *International Journal of Thermal Sciences*, 139:424–432, 2019.
- [10] E. Majchrzak, G. Kałuša, and J. Poteralska. Application of the DRBEM for numerical solution of Cattaneo-Vernotte bioheat transfer equation. 03 2008.
- [11] K. Mitra, S. Kumar, A. Vedevarz, and M. K. Moallemi. Experimental Evidence of Hyperbolic Heat Conduction in Processed Meat. *Journal of Heat Transfer*, 117(3):568–573, 08 1995.
- [12] H. H. Pennes. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting human forearm. 1948. *Journal of applied physiology*, 85 1:5–34, 1998.
- [13] M. Ramšak and L. Škerget. Heat diffusion in fractal geometry cooling surface. *Thermal Science*, 16:955–968, 01 2012.
- [14] M. Ramšak and L. Škerget. A highly efficient multidomain BEM for multimillion subdomains. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 43:76–85, 2014.
- [15] W. Roetzel, N. Putra, and S. K. Das. Experiment and analysis for non-Fourier conduction in materials with non-homogeneous inner structure. *International Journal of Thermal Sciences*, 42(6):541–552, 2003.
- [16] N. Sahoo, S. Ghosh, A. Narasimhan, and S. K. Das. Investigation of non-Fourier effects in bio-tissues during laser assisted photothermal therapy. *International Journal of Thermal Sciences*, 76:208–220, 2014.
- [17] D. Y. Tzou. A Unified Field Approach for Heat Conduction From Macro- to Micro-Scales. *Journal of Heat Transfer-transactions of The Asme*, 117:8–16, 1995.
- [18] P. Vernotte. Les paradoxes de la theorie continue de l'equation de la chaleur. *Compt. Rendu*, 246:3154–3155, 1958.
- [19] Q. Zhang, Y. Sun, and J. Yang. Bio-heat response of skin tissue based on three-phase-lag model. *Scientific Reports*, 10, 10 2020.



## *Numerična določitev tlačnega padca znotraj vial zaradi geometrije vial s sklopljenim 0D-RDT modelom*

Blaž Kamenik<sup>1</sup>, Matjaž Hriberšek<sup>1</sup> in Matej Zadavec<sup>1</sup>

### *Numerical determination of the pressure drop inside the vial due to the geometry with the coupled 0D-CFD model*

**Povzetek.** Modeliranje liofilizacije v viali se pogosto izvaja na ravni ene same vial. Pri postavitvi numeričnega modela je glavni poudarek na prenosu toplote in mase znotraj liofilizata, medtem ko se dinamika hlapov v zgornjem delu vial upošteva zgolj s sistemskim tlakom, uporabljenim kot tlačni robni pogoj. Predstavljeno delo ponuja globlji vpogled v interakcijo sublimacijskega toka vodne pare in tlaka znotraj vial z dinamiko sublimacije na meji sublimacije. To je doseženo s sklopljeno numerično rešitvijo prenosa toplote in mase znotraj produkta s pomočjo 0D modela, ki opisuje zamrznjeno domeno (led) in tok tekočine znotraj geometrije vial z nameščenim zamaškom, računanim s pomočjo Računske dinamike tekočin (RDT). 0D model je bil uporabljen za izračun sublimacijskih masnih tokov in toplotnih tokov na vialo, pri čemer so rezultati masnega toka vodne pare in temperatura posredovana 3D RDT modelu kot novi robni pogoji za izračun dinamike toka stisljive tekočine v viali. Rešitev tlačnega polja RDT tako zagotovi popravek v obliki nadtlaka za tlačni robni pogoj v 0D modelu in s tem zaključi numerično skloppljanje.

**Abstract.** Modeling lyophilization in a vial is frequently done on a single vial level. When setting up a numerical model, the main focus is on heat and mass transfer inside the lyophilizate, whereas the vapor dynamics in the upper part of the vial is taken into account simply through imposing the system pressure as a pressure boundary condition. The present paper offers a deeper insight into the interaction of the sublimated vapor flow and the corresponding vapor pressure conditions with the sublimation dynamics at the sublimation front. This is achieved through a coupled numerical solution of the heat and mass transfer inside the product by means of a 0D model describing the frozen domain (ice) and the 3D fluid flow inside the vial geometry with the installed stopper, computed by means of Computational Fluid Dynamics. The 0D model was used for the computation of sublimation mass flow rates and as well as heat transfer rate to the vial, with the results of the water vapor mass flow rate and the temperature communicated to the 3D CFD model as new inlet boundary conditions for computation of compressible fluid flow dynamics inside the vial. The CFD pressure field solution provided thus a correction in a form of an overpressure to the pressure boundary condition in the 0D model, thus completing the numerical coupling.

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

## 1 Uvod

Liofilizacija je postopek, pri katerem se zelena snov suši pri nižjih temperaturah kot pri običajnem sušenju [8]. Za sublimacijo topila, običajno vode, v kateri je raztopljen snov, se vodna raztopina zamrzne in s znižanjem tlaka v sistemu se vzpostavijo sublimacijski pogoji. Končni cilj postopka je produkt, ki ima dolgo življenjsko dobo in pri rehidraciji ne spremeni svojih lastnosti. Proces je sestavljen iz treh faz. Prva faza je faza zamrzovanja, med katero se produkt pri atmosferskem tlaku in nizkih temperaturah zamrzne. Temu sledi primarno sušenje, med katero se zniža sistemski tlak, in dovaja toploto potrebno za sublimacijo, tipično skozi grete police. Končna faza je sekundarno sušenje, ki se začne ko je odstranjen ves led in ostane le vlažen porozen produkt. Zaradi preostale vlage, je potrebno dodatno modificirati pogoje v obliki dodatnega povišanja temperature police, za nadaljno desorpcijo vezane vlage. Če se preko police dovaja previsoka količina toplote, odvisno od lastnosti sušene snovi, lahko produkt postane nestabilen in pride do porušitve strukture [7]. Da se temu izognemo, se optimalne temperature police in sistemske tlake določijo s serijo eksperimentov. Kljub temu obstaja možnost, da v primeru določitve optimalne temperature in sistemskega tlaka na eni napravi, zaradi različnih hidrodinamičnih razmer sušilnega cikla ne bo mogoče prenesti na večjo napravo. Zato se v praksi uporablja bolj konzervativne sušilne cikle, ki pa vodijo do daljših časov sušenja. Zaradi velikega števila parametrov, ki vplivajo na tokovno polje znotraj sistema in vplivajo na proces sušenja, se poskuša te vplive opisati z analitičnimi ali numeričnimi modeli. Ker te vplive težko ovrednotimo eksperimentalno, se za raziskave vedno več uporabljajo RDT kode. Primeri takšnega načina modeliranja so modeli, ki opisujejo vpliv geometrije povezovalne cevi [1, 3, 5], pozicije in oblike ventilov [5], depozicijo vodne pare na hladnih stenah kondenzatorja [9] in zadušitve toka [6] [2] (ang. choked flow). S pomočjo teh modelov dobimo podrobnejši vpogled v tokovna polja znotraj sistema in vpliv geometrije sistema na sam proces. Kljub dejstvu, da najdemo kar nekaj del na temo 3D numeričnega modeliranja, dela na temo tlačnega padca znotraj vial, ki ga je eksperimentalno potrdil Pikal [10], ne najdemo. Na podlagi eksperimentalnih meritev, se je nato predstavilo korelacije za opis tlačno odvisnega tlačnega padca. Korelacije so bile razvite za specifične gumijaste zamaške (uporabljene med eksperimentom), kar zaradi dejstva, da obstaja veliko število različno oblikovanih zamaškov in vial, predstavlja težavo pri splošni uporabi za zamaške različnih oblik. To delo se tako osredotoča na razvoj in validacijo specifičnega sklopljenega 3D CFD modela liofilizacije v viali za numerično simuliranje prenosa toplote in mase tekom procesa, s katerim bo mogoče ovrednotiti vpliv geometrije vial in gumjastega zamaška na sušenje.

## 2 Računski modeli

Za razvoj razmeroma hitrega numeričnega modela je računalniški model omejen na eno vialo, ki predstavlja vialo (tip R6), nameščeno na sredino police. Ker je uporabljena poenostavljena oblika sušilne komore, neposreden izračun prenosa toplote na vialo v programu RDT ni mogoč. Za modeliranje prenosa toplote na vialo je zato uporabljen namenski 0D podmodel, model sublimacije produkta (ledu), kjer je upoštevan prispevek iz spodnje in zgornje police. Končni računski model torej združuje simulacijo prenosa toplote na vialo in kinetiko sublimacije v zamrznjenem območju (z uporabo namenskega 0D podmodela), ter izračun tokovnega polja

znotraj vial (začeni s sublimacijsko fronto), skozi odprtine zamaška in v okolici vial z uporabo RDT modela. Izračun RDT modela temelji na rešitvi Navier-Stokesovih enačb, v režimu delnega zdrsa tekočine. Model prenosa toplote, ki temelji na določitvi  $K_v$ , je implementiran v kvazi stacionarnem modelu prenosa toplote za izračun dovoda toplote na vialo (glej poglavje 2.1).

## 2.1 0D model sublimacije ledu

Shema prenosnih pojavov znotraj vial, napolnjene z zamrznjeno vodo (ledom) je prikazana na Sliki 1. Predpostavi se da se večina toplote dovaja skozi dno vial, le ta nato potuje skozi led v smeri sublimacijske fronte. Ker je uporabljen 0D model, se namesto toplotne prevodnosti ledu uporabi efektivna toplotna prevodnost. Toplotni tok  $\dot{Q}_{bot}$  od dna ledu v smeri sublimacijske fronte se zapiše kot

$$\dot{Q}_{bot} = A_{bot} \lambda_1 \frac{dT}{dx} = A_{bot} \lambda_1 \frac{T_{bot} - T_{sub}}{L_{ice}} \quad (1)$$

kjer je  $A_{bot}$  velikost zunanega preseka vial (izračunano iz zunanjega premera  $d_v$ ),  $dT/dx$  temperaturni gradient med temperaturo na dnu ledu  $T_{bot}$  in temperaturo na sublimacijski fronti  $T_{sub}$ . Efektivna toplotna prevodnost  $\lambda_1$  0D domene se izračuna kot površinsko utežena vsota toplotne prevodnosti stekla  $\lambda_{glass}$  in zamrznjenega ledu  $\lambda_{ice}$  kot

$$\lambda_1 = \frac{(A_{bot} - A_p)}{A_{bot}} \lambda_{glass} + \frac{A_p}{A_{bot}} \lambda_{ice} \quad (2)$$

kjer je  $A_p$  velikost preseka zamrznjenega produkta (izračunano iz zunanjega premera  $d_p$ ). Na vialo se iz zgornje police s toplotnim sevanjem dovaja tudi toplotni tok  $\dot{Q}_{rad}$ , izračunan kot

$$\dot{Q}_{rad} = F_{12,t} A_{bot} \sigma (T_{sh}^4 - T_{sub}^4) \quad (3)$$

kjer je  $F_{12,t}$  oblikovni faktor,  $\sigma$  Stefan-Boltzmanova konstanta in  $T_{sh}$  temperatura police. V obravnavanem primeru, se uporabi predpostavka kvazi-stacionarnega prenosa toplote in mase, kjer se vsa dovedena toplota porabi za sublimacijo ledu. Sublimacijski masni tok, je v tem primeru izračunan na podlagi vsote vnosa toplote na dno vial  $\dot{Q}_{bot}$  in vnosa toplote neposredno na sublimacijsko fronto  $\dot{Q}_{rad}$  kot

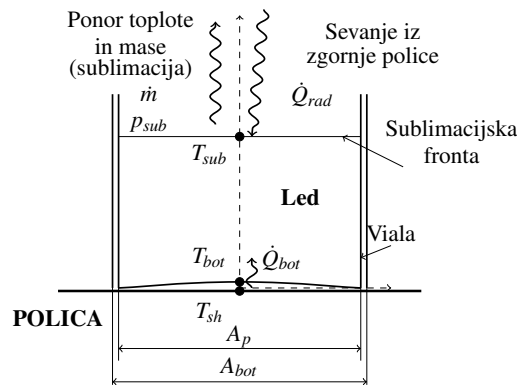
$$\dot{m} = \frac{\dot{Q}_{rad} + \dot{Q}_{bot}}{\Delta h_{sub}} \quad (4)$$

kjer je  $\Delta h_{sub}$  sublimacijska entalpija vode. Toplotni tok na dno vial  $\dot{Q}_{bot}$  se izračuna kot

$$\dot{Q}_{bot} = K_v A_{bot} (T_{sh} - T_{bot}) \quad (5)$$

kjer je  $K_v$  koeficient toplotne prehodnosti na vialo. Temperatura na medfazni površini led-vodna para  $T_{sub}$  (sublimacijski fronti), ki je odvisna od parcialnega tlaka vodne pare tik nad ledom  $p_{sub}$  je izračunana iz Clausius-Clapeyronove enačbe

$$T_{sub} = \frac{6139,6}{28,8912 - \ln(p_{sub})} \quad (6)$$



**Slika 1:** Toplotni in masni tokovi v OD modelu kinetike sušenja produkta v viali.

Iz nove mase ledu izračunamo novo višino ledu kot

$$h_{ice} = \frac{m_{ice}}{\rho_{ice} A_p}. \quad (7)$$

kjer je  $\rho_{ice}$  gostota ledu. Izračun koeficienta prehoda toplote  $K_v$  temelji na modelu prenosa toplote, predstavljenem v delu [11], kjer je sestavljen iz več vnosov toplote skozi različne površine viala. Toplota se dodaja s prevodom (skozi kontaktno površino med vialo in polico), s toplotnim sevanjem iz gretih polic in s prevodom skozi plin znotraj sušilne komore. Prispevek dovoda toplote s konvekcijo je zaradi nizkega tlaka v sistemu mogoče zanemariti.

## 2.2 3D RDT model liofilizacije

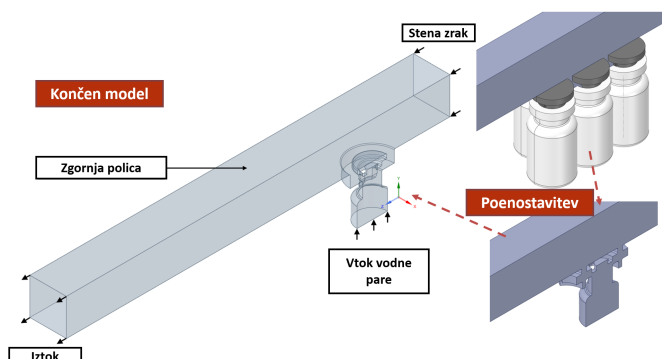
Vodilne enačbe za opis toka tekočine v viali so sestavljene iz osnovnih fizikalnih zakonov pretoka stisljive tekočine, vključno z ohranjanjem mase, ohranjanjem gibalne količine, ohranjanjem toplotne energije, ohranjanjem inertnega plina in ohranjanjem vodne pare. Za njihovo rešitev je bila uporabljena koda ANSYS Fluent [4] s pristopom na osnovi ločenega algoritma SIMPLE [4]. Plin znotraj komore je sestavljen iz dveh komponent ( $H_2O$  pare in  $N_2$ ), zato je uporabljen model za večkomponentni sistem (ang. species transport). Za diskretizacijo tlaka je uporabljen algoritem PRESTO! (PREssure Stagging Option), s sovetno shemo drugega reda za gostoto, gibalno količino, masni delež komponent in energijo. Zaradi nizkih sistemskih tlakov, imajo molekularni učinki pomembno vlogo [12], zato je potrebno uporabiti popravke za robne pogoje pri modelih, ki temeljijo na predpostavki kontinuuma. V našem primeru smo uporabili Maxwellov model zdrsa na steni, v programu ANSYS Fluent [4] implementiran kot

$$u_w - u_g = \left( \frac{2 - \alpha_t}{\alpha_t} \right) \lambda \frac{\partial u}{\partial n} \quad (8)$$

kjer je  $\partial u / \partial n$  odvod hitrosti plina vzdolž stene (vzporedno) v smeri normale na steno (ovrednoteno na steni),  $u_w - u_g$  je zdrs hitrosti na steni in  $\alpha_t$  tangencialni akomodacijski koeficient. V primeru razredčenega toka plina, se na stenah pojavi tudi temperaturni skok [4]

$$T_w - T_g = 2\lambda \left( \frac{2 - \alpha_c}{\alpha_c} \right) \frac{\partial T}{\partial n} \approx 2 \left( \frac{2 - \alpha_c}{\alpha_c} \right) \frac{\lambda}{\delta} (T_g - T_c), \quad (9)$$

kjer je  $\partial T / \partial n$  parcialni odvod temperature plina v smeri normale na steno (evaluirano na steni),  $T_w$  je temperatura stene,  $T_g$  je temperatura plina tik ob steni in  $\alpha_c$  termičen akomodacijski koeficient.



**Slika 2:** Poenostavitev geometrijskega modela (desni del slike) in končna računsko domena (levo).

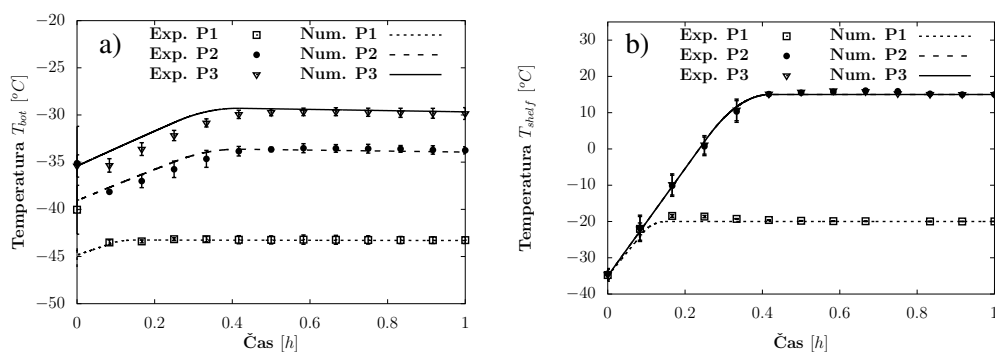
### 2.3 3D-0D sklapljanje

Pomemben del računalniškega modela je soodvisnost sublimacijskega masnega toka, tlačnih pogojev znotraj viala in temperature ledu. Za sklapljanje 0D modela in CFD modela (toka vodne pare) so bile uporabljene uporabniško definirane funkcije (UDF). Tlak na sublimacijski fronti (iz CFD modela) se posreduje v 0D model, kjer se uporabi kot robni pogoj za izračun novega sublimacijskega masnega toka in temperature plina. Le ta se nato uporabita kot robna pogoja na vstopu v CFD modelu, čemur sledi CFD izračun tokovnega polja skozi sistem, s čimer dobimo tlak nad sublimacijsko površino.

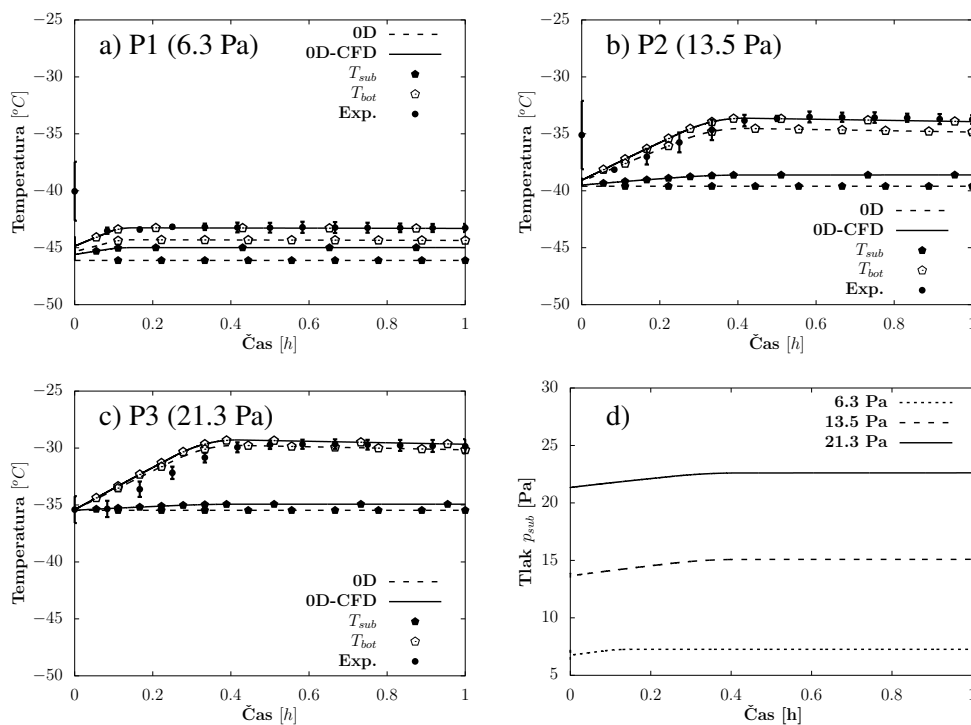
### 2.4 Geometrijski model in robni pogoji

Končni geometrijski model je sestavljen iz viala, napol vstavljenega gumijastega zamaška in dela okolice viala v obliki kanala, ki ga tvorijo zgornja polica in vrhovi zamaškov. Poenostavljena okolica viala se uporablja za modeliranje vpliva obratovalnega tlaka v komori, ter vpliva povprečne temperature komore na snovske lastnosti plina. Na sublimacijski fronti, sta bila predpisana masni tok in temperatura vodne pare, ki ju izračuna 0D model (v odvisnosti od tlaka na sublimacijski fronti). Na "iztoku" iz poenostavljene okolice viala je bil definiran statični tlak 0 Pa, ki skupaj z referenčnim tlakom znotraj računsko domene, predstavlja absolutni tlak. Na steni "Stena zrak" je bil predpisan molski delež vodne pare 0,98, s čimer se v domeno dovaja inertni plin. Ker se viala nahaja na sredini police, in je obdana z drugimi vialami, se je na površinah viala in gumijastega zamaška predpisalo adiabatni robni pogoj, saj se predpostavi, da se toplota dovedena iz spodnje police porabi za sublimacijo ledu. Dovod toplote na vialo, se modelira z 0D modelom, ki je opisan v odseku 2.1. Obravnavani so bili trije primeri, pri različnih temperaturah police in sistemskih tlakih. Za konzervativni protokol (P1) se je predpisal sistemski tlak 6,3 Pa s temperaturo police  $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$ , za drugi protokol (P2) 13,5 Pa s temperaturo police  $+15\text{ }^{\circ}\text{C}$ , za tretji protokol (P3) pa 21,3 Pa s temperaturo police  $+15\text{ }^{\circ}\text{C}$ .





**Slika 3:** a) Temperatura na dnu ledu  $T_{bot}$  iz sklopljenega modela CFD-0D, v primerjavi z eksperimentalno določenimi temperaturami b) Temperatura police med eksperimentom in numeričnim modelom (linije P2 in P3 se prekrivajo). Intervali zaupanja za eksperimentalne rezultate izračunani iz treh meritev z uporabo Studentove  $t$  porazdelitve.



**Slika 4:** a), b) in c): Temperaturni profili na dnu viala  $T_{bot}$  in na sublimacijski fronti  $T_{sub}$ , pridobljeni s sklopljenim (skrajšano CFD-0D) in samostojnim 0D (skrajšano 0D) modelom v primerjavi s eksperimentom za tri različne tlake v komori d) tlaka tik nad ledom.

**Tabela 1:** Eksperimentalni in numerični procenti osušitve (ang. percentage of drying-p.d.) in relativna odstopanja od eksperimentalnih rezultatov. V primeru masnega toka so referenčne vrednosti rezultati 0D modela. Intervali zaupanja za eksperimentalne rezultate izračunani iz treh meritev z uporabo Studentove  $t$  porazdelitve (95% stopnja zaupanja).

$P_c$	Procent osušitve [%]			Relativno odstopanje [%]		
	Exp.	0D	CFD-0D	p.d. 0D	p.d. CFD-0D	$\bar{m}$
6.3	4.13 ± 0.16	3.88	3.72	-6.0	-9.9	-4.3
13.5	8.98 ± 0.21	9.64	9.46	7.3	5.4	-1.8
21.3	9.86 ± 0.52	10.49	10.38	6.4	5.3	-1.1

### 3 Rezultati

Za validacijo modela je bil izbran časovno odvisni preračun, saj se masni tok vodne pare med eksperimentom postopno povečuje, zaradi višanja temperature police, kot je prikazano na sliki 3b). Če primerjamo temperaturne profile iz eksperimenta in numerične simulacije, prikazano na Sliki 3a), ugotovimo, da v vseh simuliranih primerih, obstajajo razlike med numeričnimi rezultati in eksperimentalnimi meritvami v začetni fazi sušenja. To je posledica predpostavke kvazi-stacionarnega stanja 0D modela, ki je grob približek začetne faze sušenja. Po prvih parih minutah sušenja začne temperatura na dnu ledu in na sublimacijski fronti naraščati, zaradi poviševanja temperature police (povišanje toplotnega toka), nato sledi skoraj stacionarno stanje, kjer temperatura le rahlo pada, kar opazimo tudi pri eksperimentu. Kot vidimo, kvazi stacionaren 0D model pokaže zelo dobro ujemanje med eksperimentalno izmerjenimi temperaturami in numeričnimi rezultati, kot je razvidno na Sliki 3a).

Na sliki 4 sta prikazana temperaturna profila na dnu vial (led) in na sublimacijski fronti. Za primer tlaka v komori 6,3 Pa se simulirana temperatura na dnu ledu ujema s povprečno temperaturo eksperimentalnih meritev (0,04 °C nižja kot v eksperimentu ob 1 h), za 13,5 Pa je je na spodnji meji intervala zaupanja (0,2 °C nižje kot v eksperimentu ob 1 h) in za 21,3 Pa je na svoji zgornji meji (0,18 °C več kot v eksperimentu pri 1 h). Kot lahko opazimo, samostojni 0D model (brez CFD sklopjanja), kjer je tlačni robni pogoj (tlak vodne pare tik nad ledom) enak tlaku znotraj komore, napove veliko nižje temperature za primere tlaka v komori 6,3 Pa in 13,5 Pa (1,1 °C nižje kot v eksperimentu ob 1 uri). Pri višjih tlakih (21,3 Pa) je razlika med napovedjo sklopljenega CFD-0D in samostojnega 0D modela skoraj zanemarljiva, saj sta obe napovedi znotraj intervala zaupanja (temperatura, določena z 0D modelom, je 0,31 °C nižja kot v eksperimentu 1 h). V tabeli 1, kjer so prikazani deleži osušitve lahko vidimo, da je za primer sklopljenega modela pri sistemskem tlaku 6,3 Pa okoli 10% nižji kot med eksperimentom, pri višjih tlakih pa okoli 5% višji. Samostojen 0D model pri tlaku 6,3 Pa napove 6% nižji masni tok, pri višjih tlakih pa med 6 in 7 % višji masni tok.

### 4 Zaključki

Na prenos snovi med sušenjem v viali, vplivajo tlačni pogoji v sistemu in tudi znotraj vial. Pričujoče delo daje globlji vpogled v tlačne pogoje v viali s pomočjo namenskega modela toka pare z RDT in njegov vpliv na rezultate, pridobljene s poenostavljenimi modeli liofilizacije (0D), povezanimi z vialo, ki se običajno uporabljajo pri napovedih procesa. Sklopljeni CFD-0D model kaže boljše ujemanje z eksperimentalno izmerjenimi temperaturami na dnu ledu kot

samostojni 0D model, s konstantnim tlačnim robnim pogojem (enak tlaku v sistemu). 0D model napove nižje temperature kot CFD-0D model za vse obravnavane primere.

## 5 Literatura

- [1] A. A. Barresi and D. L. Marchisio. Computational Fluid Dynamics data for improving freeze-dryers design. *Data in Brief*, 19:1181–1213, 2018.
- [2] A. Ganguly, A. A. Alexeenko, S. G. Schultz, and S. G. Kim. Freeze-drying simulation framework coupling product attributes and equipment capability: Toward accelerating process by equipment modifications. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 85(2):223–235, 2013.
- [3] A. Ganguly, S. L. Nail, and A. A. Alexeenko. Rarefied gas dynamics aspects of pharmaceutical freeze-drying. *Vacuum*, 86(11):1739–1747, 2012.
- [4] A. Inc. ANSYS Á® Academic Research, Release 17.2, Help System, Solver Theory, Multi-phase Flow Theory. 2016.
- [5] D. L. Marchisio, M. Galan, and A. A. Barresi. Use of computational fluid dynamics for improving freeze-dryers design and process understanding. Part 2: Condenser duct and valve modelling. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 129(January):45–57, 2018.
- [6] S. M. Patel, S. Chaudhuri, and M. J. Pikal. Choked flow and importance of Mach I in freeze-drying process design. *Chemical Engineering Science*, 65(21):5716–5727, 2010.
- [7] S. M. Patel, S. Nail, M. Pikal, R. Geidobler, G. Winter, A. Hawe, J. Davagnino, and S. Rambhatla Gupta. Lyophilized drug product cake appearance: What is acceptable? *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 106(7):1706–1721, 2017.
- [8] G.-W. O. Peter Haseley. *Freeze-drying*. WILEY-VCH, Weinheim, Germany, 3 edition, 2018.
- [9] M. Petitti, A. A. Barresi, and D. L. Marchisio. CFD modelling of condensers for freeze-drying processes. *Sadhana - Academy Proceedings in Engineering Sciences*, 38(6):1219–1239, 2013.
- [10] M. Pikal, M. Roy, and S. Shah. Mass and heat transfer in vial freeze-drying of pharmaceuticals: Role of the vial. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 73(9):1224–1237, 1984.
- [11] M. Ramšak, M. Zadavec, J. Ravnik, J. Iljaž, M. Avanzo, K. Kočever, Š. Irman, M. Cegnjar, I. Golobič, A. Sitar, and M. Hriberšek. Numerical and experimental modeling of lyophilization of lactose and mannitol water solutions in vials. *Computational Thermal Sciences: An International Journal*, 12(5):401–415, 2020.
- [12] J. J. Shu, J. Bin Melvin Teo, and W. Kong Chan. Fluid velocity slip and temperature jump at a solid surface. *Applied Mechanics Reviews*, 69(2), 2017.



## ***Metoda za sočasno brezkontaktno merjenje modula elastičnosti in temperaturnega razteznostnega koeficienta materialov za 3D tisk***

Gašper Krivic<sup>1</sup> in Janko Slavič<sup>1</sup>

### ***An experimental method for simultaneous noncontact identification of elastic modulus and coefficient of thermal expansion in 3D printed materials***

**Povzetek.** V zadnjem času se za FDM tehniko 3D tiska uveljavljajo alternativni kompozitni materiali, katerih lastnosti so še precej neraziskane. V delu je predstavljena brezkontaktna eksperimentalna metoda za sočasno določevanje modula elastičnosti in temperaturnega razteznostnega koeficienta (TRK) 3D natisnjenih struktur. Modul elastičnosti določimo iz lastne frekvence strukture, medtem ko TRK določimo iz meritev temperature s termokamero in meritev deformacij z metodo korelacije digitalnih slik. Uporaba metode je prikazana za identifikacijo ortotropnih materialnih lastnosti PLA in kompozitnega materiala iz PLA z dodatkom lesnih delcev.

**Abstract.** Recently, alternative composite materials have been promoted for FDM technique of 3D printing, but their properties are still largely unexplored. This paper presents a non-contact experimental method for the simultaneous determination of elastic modulus and coefficient of thermal expansion (CTE) in 3D printed materials. The elastic modulus is obtained from the natural frequency of the structure, while the CTE is obtained from temperature measurements with a thermal camera and strain measurements with the digital image correlation method. The application of the method is demonstrated for the identification of the orthotropic material properties of PLA and a composite material made of PLA with the addition of wood particles.

## **1 Uvod**

Tehnika modeliranja s taljenim nanosom (FDM), znana tudi kot *Fused Filament Fabrication* (FFF), je ena izmed najbolj popularnih in splošno dostopnih tehnik 3D tiska [3]. K večji uporabnosti te tehnike je v zadnjih letih prispeval tudi razvoj novih pametnih, prevodnih, biomaterialov

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

in kompozitnih materialov z dodatkom aluminijskega, železnega, lesnega, karbonskih vlaken, steklenih vlaken in grafena [6]. Novi materiali so omogočili tisk večnamenskih naprav, kot so senzorji [1, 5] in aktuatorji [8, 19], v enem procesu.

Elektrotermični mehki aktuatorji so zaradi svoje fleksibilnosti in prilagodljivosti zelo uporabni na področju mehatronskih in robotskih sistemov, saj omogočajo velike deformacije, so lahki in imajo nizko porabo energije [16]. Pomembni lastnosti teh mehkih aktuatorjev sta doseg oz. hod in nosilnost oz. prijemalna ali potisna sila. Ti sta poleg geometrije mehkega aktuatorja odvisni še od modula elastičnosti in temperaturnega razteznostnega koeficienta (TRK) uporabljenih materialov [10].

Mehanske in termične lastnosti novih materialov za FDM tisk in vpliv parametrov izdelave nanje so še precej neraziskane, zato se temu v zadnjem času posveča veliko eksperimentalnih raziskav [7, 17]. Za eksperimentalno določevanje modula elastičnosti FDM struktur prevladuje predvsem klasičen natezni preizkus [9]. Želja po hitrejših testih je pripeljala do razvoja nedestruktivnih metod merjenja modula elastičnosti: metoda impulznega vzbujanja, ultrazvočna metoda z nizko močjo in dinamična mehanska analiza (DMA) [11, 13]. Za identifikacijo TRK-ja FDM struktur se znanstveniki poslužujejo meritev s termomehansko analizo (TMA) [18], dilatometrom [2] in vlakensko Braggovo rešetko (FBG) [4]. Obstoječe uveljavljene metode ne mogočajo sočasnih meritev obeh količin, kar bi omogočalo hitro karakterizacijo materialnih lastnosti za elektrotermične mehke aktuatorje.

V tem delu je predstavljena brezkontaktna eksperimentalna metoda za sočasno določevanje modula elastičnosti in temperaturnega razteznostnega koeficienta 3D natisnjenih struktur. Na koncu je predstavljena še njena uporaba za identifikacijo ortotropnih modulov elastičnosti in TRK-jev PLA in kompozitnega materiala iz PLA z dodatkom lesnih delcev.

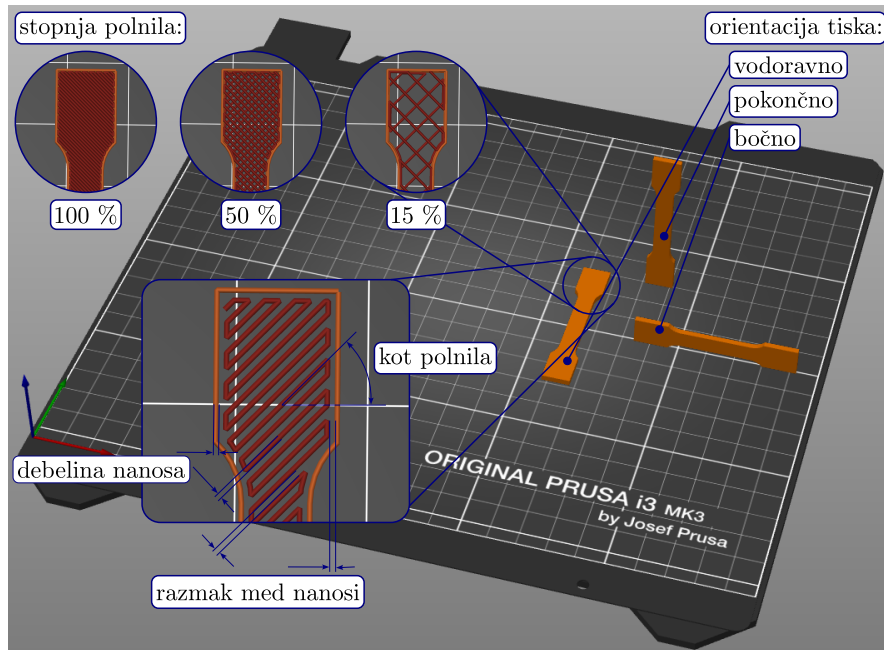
## **2 Teoretično ozadje**

Mehanske in termične lastnosti FDM struktur niso odvisne zgolj od uporabljenega materiala, temveč tudi od načina izdelave na 3D tiskalniku. Po ugotovitvah Popescuja in sodelavcev [9] so najbolj vplivni parametri izdelave: razmak med sosednjimi linijami nanosa materiala, kot polnila, širina linij nanosa materiala, stopnja polnila in orientacija tiskanja (slika 1).

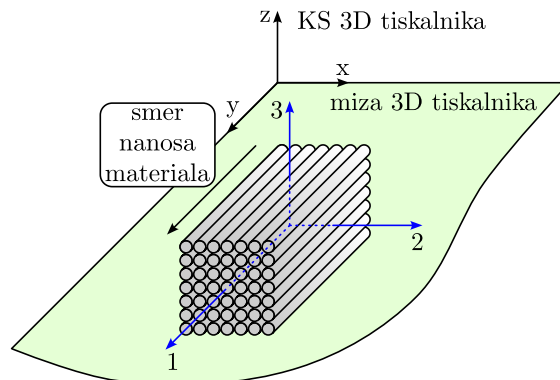
Strukture izdelane v FDM tehniki z nanašanjem materiala v eni smeri, kot je prikazano na sliki 2, kažejo simetrične materialne lastnosti v treh pravokotnih ravninah (vzdolž nanosenega materiala, prečno na vodoravno in prečno na navpično ravnino) [15]. Materialne lastnosti takih struktur se razlikujejo v treh smereh definiranih z lokalnim koordinatnim sistemom (KS) 123 (slika 2). Lokalni KS definiramo tako, da je os 1 orientirana v smeri nanosa linij materiala, os 2 pa pravokotno. Os 3 je usmerjena ortogonalno na plasti linij nanosa materiala (ravnina 1-2), kot je orientirana tudi os z 3D tiskalnika. Materialne lastnosti struktur z opisanimi lastnostmi opišemo z ortotropnim materialnim modelom.

## **3 Metoda**

Za eksperimentalno določevanje modula elastičnosti in TRK-ja 3D natisnjenih struktur smo uporabili vzorec, ki je prikazan na sliki 3. Vzorec je enkrat simetričen s šestimi konzolno



**Slika 1:** Najbolj vplivni parametri rezanja in orientacije tiskanja.



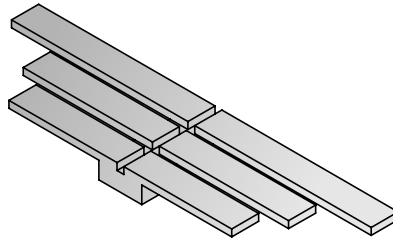
**Slika 2:** Ortogonalnost FDM struktur.

vpetimi nosilci paroma enakih dolžin. Ta oblika nam omogoča šest hkratnih meritev modula elastičnosti in TRK-ja, s čimer kontroliramo ponovljivost in zanesljivost. Število nosilcev in njihova dolžina se lahko ustrezno prilagodi potrebam testiranja.

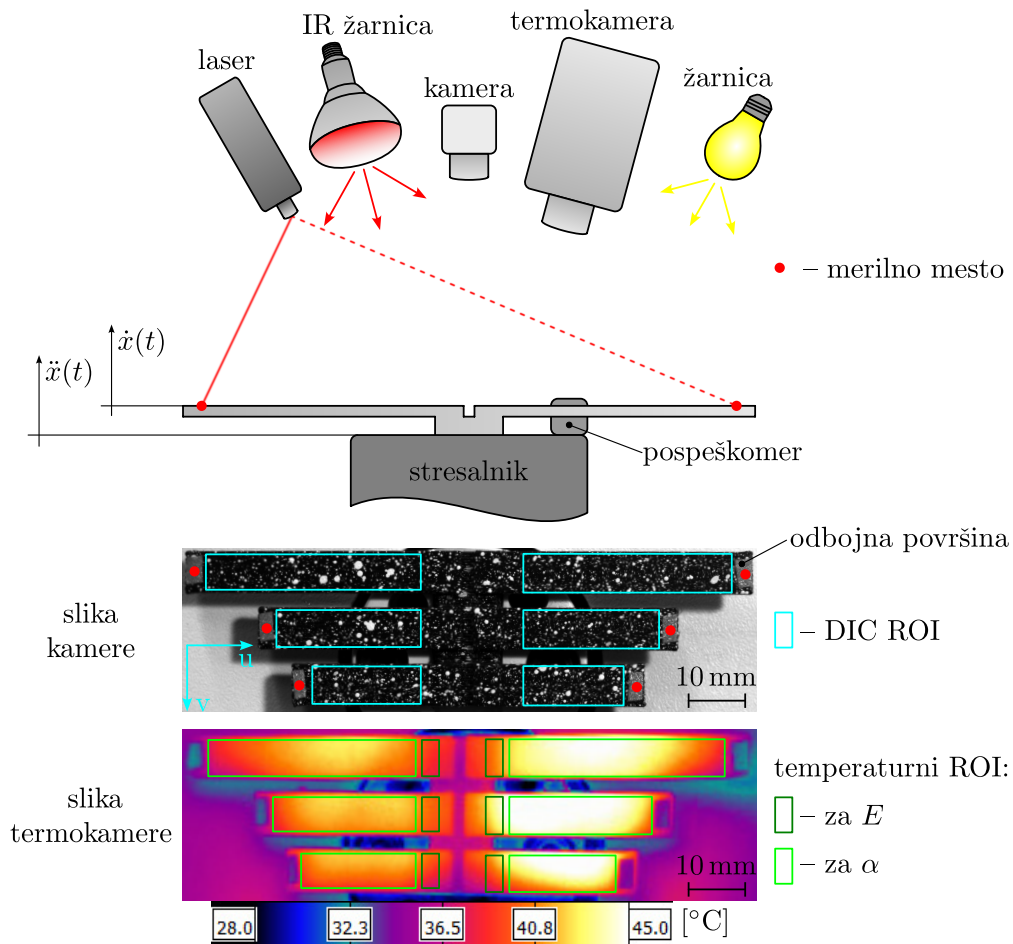
Glavna prednost izbranega vzorca je, da lahko v programu za rezanje vsakemu nosilcu predpišemo poljubne parametre izdelave. To omogoča preučevanje več različnih vplivov parametrov izdelave na enem samem vzorcu. S spreminjanjem orientacije tiskanja vzorca in kota polnila nosilcev lahko določimo module elastičnosti in TRK-je ortotropnega materialnega modela.

Schema eksperimenta metode je prikazana na sliki 4.

Ko imamo 3D natisnjen vzorec z želenimi parametri, ga najprej stehamo in iz mer digitalnega



Slika 3: Geometrija uporabljenega vzorca.



Slika 4: Prikaz eksperimenta predlagane metode.

modela določimo njegovo gostoto. Na zgornjo površino vzorca nanese naključni lisasti vzorec in na konec vsakega nosilca nalepimo odbojni trak. Nato vzorec s sekundnim lepilom nalepimo na stresalnik in ves čas eksperimenta vzbujaemo z belim šumom. Vzbujanje spremljamo s pospeškometerom na glavi stresalnika, hitrostni odziv nosilcev pa z laserskim vibrometrom na merilnih mestih. Izberemo število temperaturnih ciklov  $N_{\text{cikl}}$  med želeno minimalno  $T_{\text{min}}$  in

maksimalno  $T_{\max}$  povprečno površinsko temperaturo vzorca. Izberemo tudi temperaturni korak za merjenje odziva nosilcev  $\Delta T_{\text{odz}}$  ob segrevanju in ohlajanju vzorca.

Meritev začnemo s sinhronim zajemom referenčne slike kamere in termokamere ter meritvijo odziva na vsakem nosilcu pri sobni temperaturni. Vzorec ves čas eksperimenta osvetljujemo za kvalitetnejšo sliko kamere. Sledi ciklično prižiganje IR grelne žarnice z relejnim vezjem za segrevanje vzorca. Ko je IR žarnica ugasnjena istočasno zajamemo sliko z obema kamerama, IR svetloba namreč moti sliko predvsem termokamere. Čas osvetljevanja prilagajamo, da ohranjamo konstantno hitrost segrevanja vzorca. Iz slike termokamere razberemo povprečno temperaturo celotnega vzorca ( $T$ ), na podlagi katere se odločimo, če nadaljujemo s segrevanjem ( $T < T_{\max}$ ) ali gremo v fazo ohlajanja ( $T \geq T_{\max}$ ). V fazi ohlajanja je IR žarnica ves čas ugasnjena in vzorec se hladi z odvodom toplote v okolico, še vedno pa istočasno zajemamo slike z obema kamerama. Časovni interval zajemanja slik prilagajamo, da ohranjamo konstantno temperaturno ločljivost. Ko povprečna temperatura vzorca pade pod minimalno ( $T \leq T_{\min}$ ), začnemo ponovno s fazo segrevanja ( $N += 1$ ) ali pa zaključimo z eksperimentom, če je bilo doseženo želeno število ciklov ( $N = N_{\text{cikl}}$ ). Meritev odziva nosilcev istočasno opravljamo v obeh fazah po zastavljenem temperaturnem koraku ( $\Delta T_{\text{odz}}$ ) glede na povprečno temperaturo vzorca ( $T$ ). Pri tem si shranjujemo indeks slike ob začetku in koncu merjenja odziva vsakega nosilca, da lahko določimo temperaturo meritve modula elastičnosti.

Maso vzorca pomerimo s tehtnico EMB 200-3 proizvajalca KERN, volumen pa privzamemo iz digitalnega modela. Za vzbujanje uporabljamo stresalnik LDS V406 (Bruel & Kjaer), kateremu signal generiramo z generatorjem signala DG822 (Rigol) in ojačamo z ojačevalnikom EP4000 (Behringer). Odziv merimo z laserskim vibrometrom PVD 100 (Polytec), vzbujanje pa s pospeškometerom A/127/V (DJB Instruments), primernim za temperaturno območje  $-50$ – $+125$  °C. Slike zajemamo s kamero acA4112-20um (Basler ace) in termokamero FAST M3k (Telops).

### 3.1 Določitev modula elastičnosti

Modul elastičnosti določimo iz teoretične enačbe lastne frekvence konzolno vpetega nosilca po Euler–Bernoullijevi teoriji [12]. Geometrijo vzorca smo namreč zasnovali tako, da se čim bolj približamo konzolnemu vpetju nosilcev. Dolžino, prerez in vztrajnostni moment nosilca določimo iz geometrije digitalnega modela. Gostoto materiala izračunamo iz meritve mase in volumna digitalnega modela. Iz frekvenčne prenosne funkcije identificiramo lastno frekvenco kot frekvenco, pri kateri FPF doseže največjo absolutno vrednost. Z znano lastno frekvenco glede na orientacijo tiskanja in kot polnila izračunamo ustrezen modul elastičnosti ortotropnega materialnega modela.

Temperaturo nosilca, pri kateri določimo modul elastičnosti, opredelimo kot povprečno temperaturo znotraj območja zanimanja (ROI) vseh slik, ki smo jih zajeli tekom meritve enega odziva tega nosilca. Pri tem predpostavimo, da smo zasnovali dovolj tanek nosilec, da toplotna kapaciteta materiala nosilca ne pride do izraza in je zato temperatura po debelini nosilca enaka površinski temperaturi. ROI izberemo na območju konzolnega vpetja (slika termokamere na sliki 4), tam namreč pričakujemo, da v prvi nihajni obliki nosilca pride do največjih koncentracij napetosti. Posledično je na tem območju nosilec najbolj občutljiv na temperaturne spremembe materialnih lastnosti. Izbran ROI je dovolj majhen, da v njem ne zaznamo večjih



površinskih temperaturnih gradientov. Za temperaturni gradient na ostali površini nosilca pa predpostavljamo, da bistveno ne vpliva na njegovo togost.

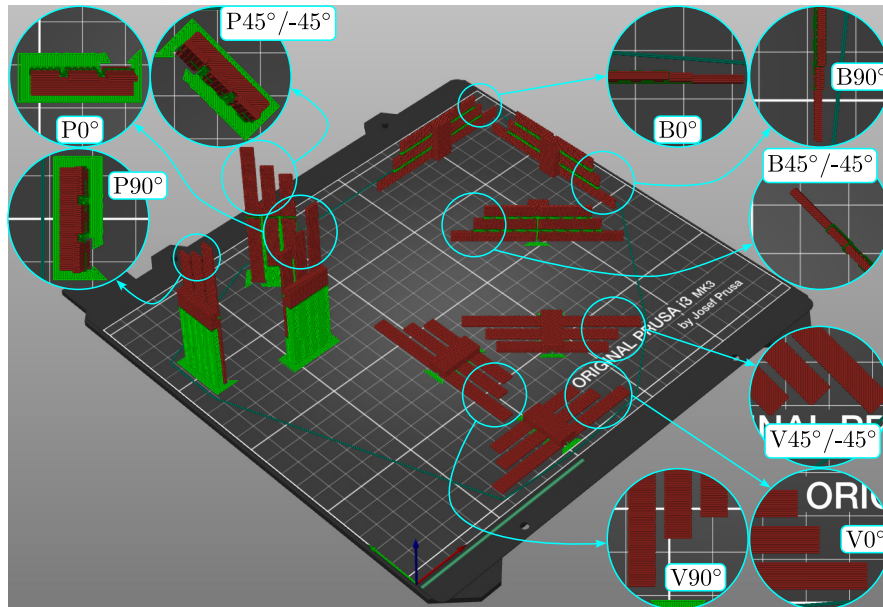
### 3.2 Določitev temperaturnega razteznostnega koeficienta

TRK za vsak nosilec določimo kot naklon premice, ki se po kriteriju najmanjše vsote kvadratov razlik najboljše prilaga točkam na  $\varepsilon$ - $\Delta T$  grafu. Povprečno deformacijo nosilca v vzdolžno (smer  $u$ ) in pravokotno (smer  $v$ ) na dolžino nosilca merimo po metodi DIC [14] z afino transformacijo ROI-ja prikazanega na sliki kamere (slika 4). V izogib robnim pojavom ROI ustrezno odmaknemo od robov nosilcev. Povprečno temperaturo nosilca določimo kot povprečno temperaturo znotraj ROI-ja na sliki termokamere (slika 4). Pri tem ponovno upoštevamo, da je nosilec dovolj tanek, da je površinska temperatura enaka temperaturi po debelini nosilca. Temperaturni gradient na površini pa kompenziramo z upoštevanjem povprečne temperature in deformacije ROI-ja. Temperaturno razliko iz meritev temperature nosilca izračunamo kot razliko med temperaturo obravnavane slike in začetne/referenčne slike. Zaradi manjše histereze, ki je posledica površinske meritve temperature, ločeno določimo TRK iz meritev ob segrevanju in ohlajanju. TRK nosilca nato določimo kot povprečni naklon obeh premic. Glede na orientacijo tiskanja, kot polnila in smer deformacije identificiramo za kateri TRK ortotropnega materialnega modela gre.

## 4 Rezultati in diskusija

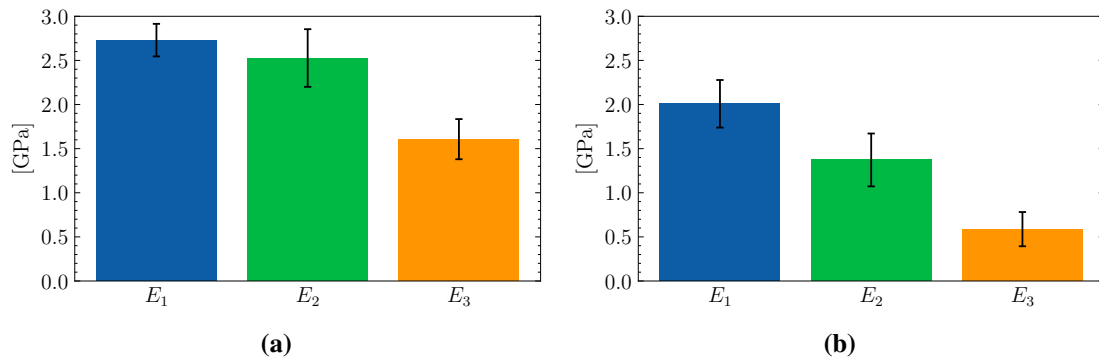
Predlagano metodo smo uporabili na dveh materialih: PLA proizvajalca Prusa Polymers imenovanim *Prusament PLA Prusa Galaxy Black* in PLA z dodatkom zmletih lesnih delcev breze proizvajalca Formfutura filament imenovanim *EasyWood*, ki ga bomo označevali kot woodPLA. Za vsak material smo natisnili devet vzorcev s stopnjo polnila 100 % in razmakom med sosednjimi linijami nanosa materiala  $-0,04$  mm (prekrivanje). Vzorce smo natisnili v vodoravni (V), bočni (B) in pokončni (P) orientaciji s kotom polnila  $0^\circ$ ,  $90^\circ$  in  $45^\circ/-45^\circ$  (zamik kota polnila za  $90^\circ$  vsako plast), kot prikazuje slika 5. Meritev modula elastičnosti in TRK-ja smo izvedli v treh ciklih v temperaturnem območju  $27-42^\circ\text{C}$  s temperaturnim korakom merjenja odziva nosilcev  $5^\circ\text{C}$ .

Slika 6 prikazuje rezultate meritev ortotropnih modulov elastičnosti pri sobni temperaturi za PLA (slika 6a) in woodPLA (slika 6b). Modula elastičnosti vzdolž ( $E_1$ ) in pravokotno ( $E_2$ ) na linije nanosa materiala sta si za PLA podobna. V tej ravnini 3D natisnjene strukture iz PLA ne kažejo izrazitih ortotropnih lastnosti, je pa modul ortogonalno na plasti linij nanosa materiala ( $E_3$ ) izrazito manjši. Spoj med plastmi linij nanosa materiala je šibkejši kot spoj s sosednjimi linijami znotraj iste plasti, kar se odraža kot manjša togost v tej smeri. Rezultati za woodPLA kažejo izrazite ortotropne lastnosti. Z dodatkom lesnih delcev PLA matrici vnesemo anizotropijo že v sam material. Namreč ob ekstrudiranju filameta skozi šobo se leseni delci orientirajo v smer toka materiala in kasneje tako tudi ostanejo. Posledično imajo 3D natisnjene strukture iz woodPLA poleg anizotropije 3D tiska le-to prisotno tudi na nivoju samega materiala. Pričakovano je modul elastičnosti v smeri linij nanosa materiala ( $E_1$ ) največji, saj so v to smer orientirani tudi lesni vključki. Modul elastičnosti pravokotno na linije nanosa materiala in usmeritev lesnih delcev ( $E_2$ ) je nekoliko manjši, v ortogonalni smeri pa je tudi v tem primeru



Slika 5: 3D tisk vzorcev s preučevanimi parametri izdelave.

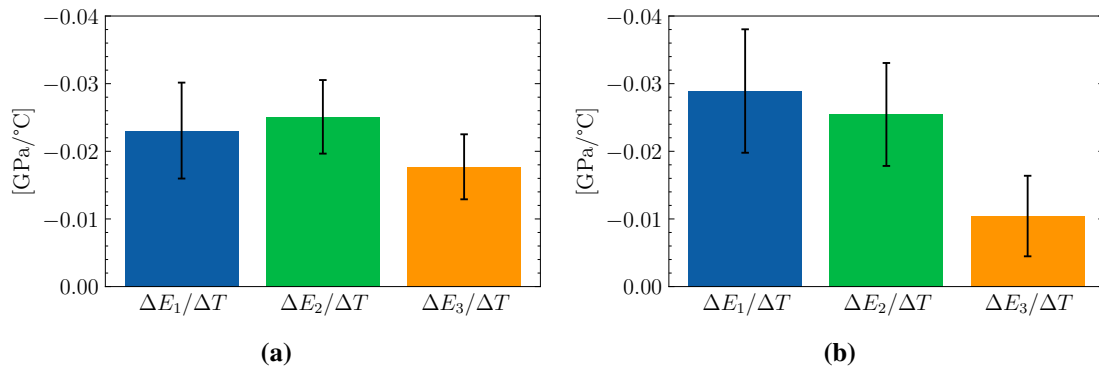
najmanjši ( $E_3$ ).



Slika 6: Moduli elastičnosti pri sobni temperaturi ortotropnega materialnega modela za a) PLA in b) woodPLA.

Meritve modulov elastičnosti ortotropnega materialnega modela kažejo trend linearnega padanja s temperaturo v merjenem temperaturnem območju. Če na meritve prilagodimo premico po metodi najmanjšega kvadratnega odstopanja, njen naklon predstavlja koeficient linearne spremembe modula elastičnosti s temperaturo. Ti so prikazani na sliki 7 za PLA (slika 7a) in woodPLA (slika 7b).

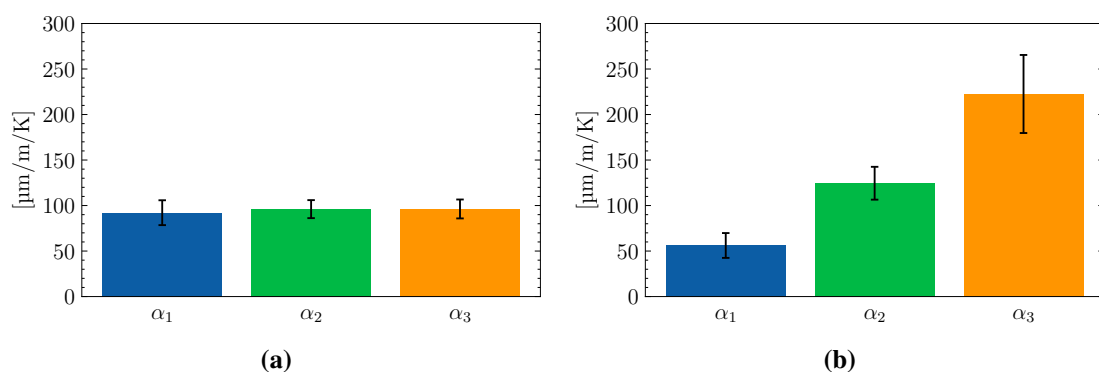
Rezultati za PLA izkazujejo podoben trend padanja modulov elastičnosti s temperaturo v vseh treh smereh. Modula elastičnosti woodPLA v smeri vzdolž in pravokotno na linije nanosa



**Slika 7:** Koeficienti linearnih sprememb modulov elastičnosti ortotropnega materialnega modela s temperaturo za a) PLA in b) woodPLA.

materiala kažeta enak trend padanja modula elastičnosti. Na drugi strani pa je modul elastičnosti v smeri ortogonalno na plasti linij nanosa materiala izrazito manj odvisen od temperature.

Slika 8 prikazuje rezultate meritev ortotropnih TRK-jev za PLA (slika 8a) in woodPLA (slika 8b). Rezultati za PLA kažejo izotropen termičen raztezek, na drugi strani pa woodPLA izkazuje izrazito ortotropne lastnosti. Ta se najmanj temperaturno razteza v smeri vzdolž linij nanosa materiala ( $\alpha_1$ ), kamor so orientirani tudi lesni delci. Ti imajo manjši TRK kot polimerna matrica in zato zmanjšujejo raztezanje. Pravokotno na linije nanosa materiala in orientacijo lesnih delcev njihovo manjše raztezanje ne pride do izraza. Takrat se lahko matrica bolj ali manj prosto razteza in posledično je TRK v tej smeri večji ( $\alpha_2$ ). Največji termični raztezek pa je v smeri ortogonalno na plasti linij nanosa materiala ( $\alpha_3$ ).



**Slika 8:** TRK-ji ortotropnega materialnega modela za a) PLA in b) woodPLA.

## 5 Zaključek

V delu smo predstavili eksperimentalno metodo za sočasno brezkontaktno merjenje modula elastičnosti in temperaturnega razteznostnega koeficienta 3D natisnjenih struktur. Modul elastičnosti določimo iz lastne frekvence 3D natisnjene strukture, TRK pa iz meritev temperature s termokamero in deformacij po metodi DIC.

Metodo smo uspešno uporabili za identifikacijo modula elastičnosti in TRK-ja PLA in kompozita PLA z dodatkom lesnih delcev skladno z ortotropnim materialnim modelom.

Predstavljena metoda omogoča hitro identifikacijo materialnih parametrov 3D natisnjenih struktur, ki so pomembni za napoved delovanja elektrotermičnih mehkih aktuatorjev.

## Literatura

- [1] M. Arh and J. Slavič. Single-Process 3D-Printed Triaxial Accelerometer. *Advanced Materials Technologies*, 7(7):2101321, July 2022.
- [2] A. M. Baker, J. McCoy, B. S. Majumdar, B. Rumley-Ouellette, J. Wahry, A. N. Marchi, J. D. Bernardin, and D. Spornjak. Measurement and Modelling of Thermal and Mechanical Anisotropy of Parts Additively Manufactured using Fused Deposition Modelling (FDM). In *Structural Health Monitoring 2017*. DEStech Publications, Inc., Sept. 2017.
- [3] P. Dudek. FDM 3D Printing Technology in Manufacturing Composite Elements. *Archives of Metallurgy and Materials*, 58(4):1415–1418, Dec. 2013.
- [4] S. N. Economidou and D. Karalekas. Optical sensor-based measurements of thermal expansion coefficient in additive manufacturing. *Polymer Testing*, 51:117–121, May 2016.
- [5] T. Košir and J. Slavič. Single-process fused filament fabrication 3D-printed high-sensitivity dynamic piezoelectric sensor. *Additive Manufacturing*, 49:102482, Jan. 2022.
- [6] M. Lalegani Dezaki, M. K. A. Mohd Ariffin, and S. Hatami. An overview of fused deposition modelling (FDM): Research, development and process optimisation. *Rapid Prototyping Journal*, 27(3):562–582, Apr. 2021.
- [7] Z. Liu, Q. Lei, and S. Xing. Mechanical characteristics of wood, ceramic, metal and carbon fiber-based PLA composites fabricated by FDM. *Journal of Materials Research and Technology*, 8(5):3741–3751, Sept. 2019.
- [8] T. B. Palmić and J. Slavič. Single-process 3D-printed stacked dielectric actuator. *International Journal of Mechanical Sciences*, 230:107555, Sept. 2022.
- [9] D. Popescu, A. Zapciu, C. Amza, F. Baci, and R. Marinescu. FDM process parameters influence over the mechanical properties of polymer specimens: A review. *Polymer Testing*, 69:157–166, Aug. 2018.
- [10] Potekhina and Wang. Review of Electrothermal Actuators and Applications. *Actuators*, 8(4):69, Sept. 2019.

- [11] B. Pszczółkowski, K. W. Nowak, W. Rejmer, M. Bramowicz, Ł. Dzadz, and R. Gałęcki. A Comparative Analysis of Selected Methods for Determining Young's Modulus in Polylactic Acid Samples Manufactured with the FDM Method. *Materials*, 15(1):149, Dec. 2021.
- [12] S. S. Rao. *Mechanical Vibrations*. Pearson, Hoboken, sixth edition edition, 2017.
- [13] O. Sai Saran, A. Prudhvidhar Reddy, L. Chaturya, and M. Pavan Kumar. 3D printing of composite materials: A short review. *Materials Today: Proceedings*, 64:615–619, 2022.
- [14] H. Schreier, J.-J. Orteu, and M. A. Sutton. *Image Correlation for Shape, Motion and Deformation Measurements*. Springer US, Boston, MA, 2009.
- [15] Y. Song, Y. Li, W. Song, K. Yee, K.-Y. Lee, and V. Tagarielli. Measurements of the mechanical response of unidirectional 3D-printed PLA. *Materials & Design*, 123:154–164, June 2017.
- [16] Y. Tian, Y.-T. Li, H. Tian, Y. Yang, and T.-L. Ren. Recent Progress of Soft Electrothermal Actuators. *Soft Robotics*, 8(3):241–250, June 2021.
- [17] S. Wickramasinghe, T. Do, and P. Tran. FDM-Based 3D Printing of Polymer and Associated Composite: A Review on Mechanical Properties, Defects and Treatments. *Polymers*, 12(7):1529, July 2020.
- [18] H. Yazdani Sarvestani, A. Akbarzadeh, D. Therriault, and M. Lévesque. Engineered bi-material lattices with thermo-mechanical programmability. *Composite Structures*, 263:113705, May 2021.
- [19] M. Zarek, M. Layani, I. Cooperstein, E. Sachyani, D. Cohn, and S. Magdassi. 3D Printing of Shape Memory Polymers for Flexible Electronic Devices. *Advanced Materials*, 28(22):4449–4454, June 2016.



## *Primerjava determinističnega in Bayesovega posodabljanja modela stavbe*

*Blaž Kurent<sup>1</sup>, Boštjan Brank<sup>1</sup> and Noémi Friedman<sup>2</sup>*

### *Comparison of Deterministic and Bayesian Model Updating of a Building*

**Povzetek.** Predstavljamo posodabljanje numeričnega modela večnadstropne lesene stavbe na podlagi eksperimentalno določenih modalnih karakteristik. Posodabljanje je izvedeno na dva načina: deterministično in probabilistično (t.j. verjetnostno) z uporabo Bayesovega izreka. Primerjamo rezultate obeh pristopov ter pokažemo prednosti in zahteve Bayesovega posodabljanja. Slednje praviloma zahteva pripravo nadomestnega numeričnega modela.

**Abstract.** We present a finite element model updating of a multi-storey timber building that is based on experimentally determined modal characteristics. The updating is carried out in two different ways; both deterministic and probabilistic (Bayesian) approach were applied. We compare results of both approaches and present the advantages and challenges of the Bayesian updating that frequently demands a construction of a surrogate model.

#### **1 Uvod**

Posodabljanje numeričnega modela v determinističnem smislu je optimizacijski problem, kjer pri dani ciljni funkciji  $f(\theta)$  iščemo takšne parametre modela  $\theta$ , da bo ciljna funkcija čim manjša. Ta je definirana kot razlika med eksperimentalno ugotovljenim odzivom sistema ter napovedjo modela, ki ga posodabljamo. Optimizacijski problem vsebuje tudi omejitve parametrov ter odzivov modela. Rešitev so vrednosti parametrov  $\theta^*$ , pri katerih se model najboljše ujema z eksperimenti. Posodabljanje modela lahko izvedemo tudi na verjetnostni način s pomočjo Bayesovega izreka  $P(\theta|\mathcal{D}) = \frac{P(\mathcal{D}|\theta)P(\theta)}{P(\mathcal{D})}$  (npr. [3]), kjer je  $\theta$  vektor vhodnih parametrov,  $\mathcal{D}$  so znani podatki, na podlagi katerih izvajamo posodabljanje,  $P(\theta)$  je apriorna verjetnost in zajema predhodno znanje o negotovosti parametrov,  $P(\mathcal{D}|\theta)$  je funkcija verjetja, ki se določi na podlagi ujemanja odziva modela z eksperimentalnim in  $P(\theta|\mathcal{D})$  je posteriorna verjetnost, ki jo iščemo. Ta nam pove verjetnost porazdelitve parametrov ob upoštevanju eksperimentalno pridobljenih podatkov. Verjetnost  $P(\mathcal{D})$  je takšna konstanta za normalizacijo,

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo, Ljubljana, Slovenija

<sup>2</sup> Institute for Computer Science and Control, Budapest, Hungary

da je integral posteriorne verjetnosti po celotnem definicijskem območju vhodnih parametrov enak 1. Verjetnostno posodabljanje se pogosto rešuje stohastično s pomočjo vzorčenja, saj se funkcije verjetja ne da zapisati v eksplicitni obliki. Metoda zahteva veliko poganjanj modela, kar je lahko časovno zamudno. Z uporabo nadomestnega modela se lahko računaska učinkovitost te metode poveča (npr. [4]). V nadaljevanju primerjamo deterministični in verjetnostni pristop k posodabljanju numeričnega modela večnadstropne lesene stavbe.

## 2 Obravnavana stavba

Obravnavamo sedemnadstropno stavbo v Glasgowu, imenovano Yoker (glej tudi [1]). Njena nosilna konstrukcija je iz križno lepljenih (CLT) plošč, ki so povezane z jeklenimi kotniki in lesnimi vijaki. Več kot 90 % vseh sten stavbe so nosilne CLT stene. Numerični model za izračun lastnih frekvenc in lastnih oblik je bil pripravljen s programom Ansys. Uporabljena je bila fina mreža (z  $2,61 \times 10^5$  vozlišč), sestavljena iz večslojnih lupinskih elementov, pri čemer je bil za vsak sloj uporabljen ortotropni materialni model. Za materialne konstante so bili upoštevani povprečni podatki proizvajalca CLT (StoraEnso). Na stavbi je bilo izvedeno modalno testiranje z vsiljenim nihanjem ter merjenje pospeškov 26 prostostnih stopenj stavbe. Na podlagi testov je bilo identificiranih 8 lastnih oblik v frekvenčnem območju do 12 Hz.

## 3 Deterministično posodabljanje modela

Po pregledu vplivnosti več parametrov z občutljivostno analizo, jih je bilo izbranih 6 za posodabljanje numeričnega modela. Čeprav so ti parametri materialne konstante različnih strukturnih delov stavbe (parametri  $e_1$ ,  $e_2$ ,  $e_3$ ,  $g_1$  in  $g_2$ ) in koristna obtežba (parameter  $q$ ), lahko zajamejo tudi efekte modelske napake. Za optimizacijo sta bili izbrani dve ciljni funkciji,

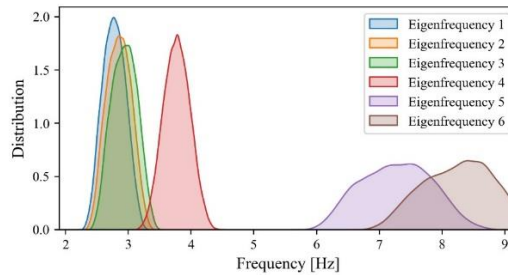
in sicer:  $\delta_{MAC} = \sum_{i=1}^6 (1 - MAC_i)^2$  ter  $\delta_{f_{rek}} = \sum_{i=1}^6 \left( \frac{f_{i,e} - f_{i,n}}{f_{i,e}} \right)^2$ , kjer je  $MAC_i$  vrednost MAC

kriterija  $i$ -tega para lastnih oblik,  $f_i$  pa je  $i$ -ta lastna frekvenca (indeks  $e$  je za eksperimentalno, indeks  $n$  pa za numerično določeno). Iz gornjih enačb se vidi, da se upošteva prvih 6 lastnih oblik in frekvenc. Optimizacija se izvede s pomočjo genetskega algoritma v programu Ansys, ki omogoča uporabo več ciljnih funkcij hkrati. Bolj natančno je deterministično posodabljanje razloženo v [1].

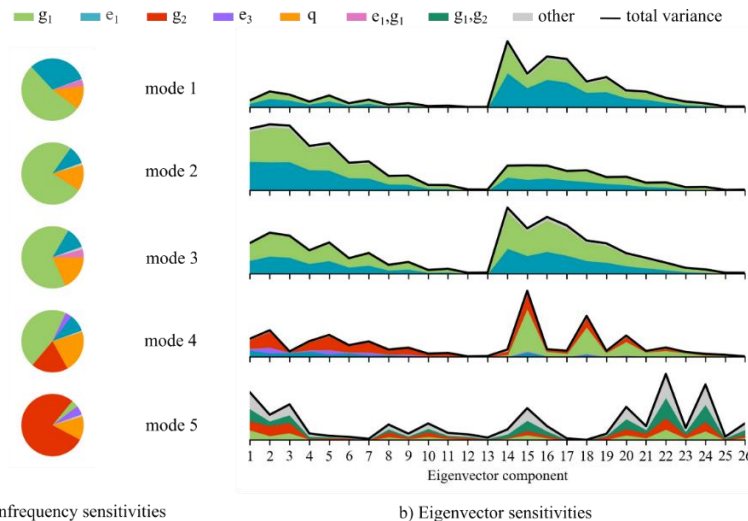
## 4 Verjetnostno posodabljanje modela

Pri verjetnostnem pristopu so vhodni parametri ostali isti, pri čemur smo jim priredili enakomerno apriorno verjetnostno porazdelitev znotraj meja, ki so ostale enake kot pri determinističnem posodabljanju. Za boljšo učinkovitost pri izvajanju stohastičnih analiz smo postavili in validirali nadomestni model z metodo gPCE (angl. *generalized polynomial chaos expansion*) - za prvih 5 lastnih frekvenc in lastnih oblik, saj pri 6. obliki nismo uspeli zagotoviti dovolj dobre natančnosti. Dve analizi, ki ju lahko izvedemo pred posodabljanjem in nam razširita razumevanje negotovosti modela in vpliva negotovosti vhodnih parametrov na rezultate sta kvantizacija negotovosti (Slika 1) in občutljivostna analiza (Slika 2). Po ustrezni pretvorbi eksperimentalnih podatkov v verjetnostni okvir se izvede Bayesovo posodabljanje

modela s pomočjo metode MCMC (angl. *Markov chain Monte Carlo*). Postopek je prikazan na Sliki 3, glej tudi [2].



**Slika 1:** Kvantizacija negotovosti prvih 6 lastnih frekvenc na podlagi apriorne verjetnosti vhodnih parametrov.



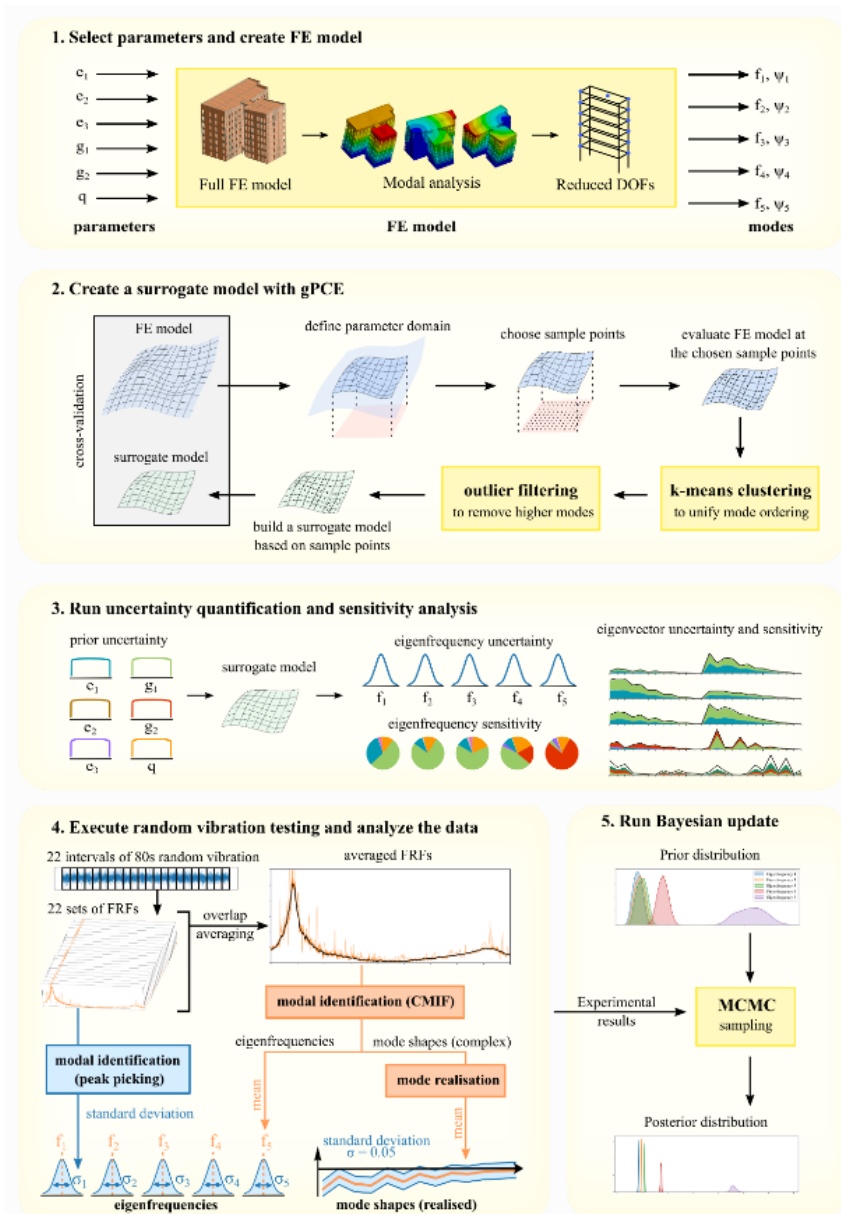
**Slika 2:** Rezultati občutljivostne analize za prvih 5 lastnih frekvenc in oblik.

## 5 Primerjava rezultatov determinističnega in Bayesovega posodabljanja

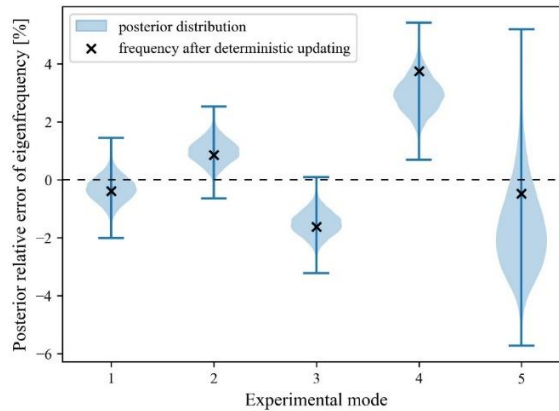
Rezultati modelov, ki ju dobimo z determinističnim in Bayesovim posodabljanjem, se dobro ujemajo z eksperimentalno določenimi modalnimi karakteristikami. Pri tem nobena od metod ne kaže večje prednosti pred drugo. Primerjava je prikazana na Sliki 4. Deterministično posodobljen model da točkovno oceno, medtem ko je rezultat Bayesovega posodabljanja posteriorna porazdelitev verjetnosti lastnih frekvenc in nihajnih oblik. Več razlik med pristopoma je v pogledu vrednosti parametrov posodobljenega modela (Slika 5). Iz obeh analiz je razvidno, da so prisotni učinki, ki zmanjšujejo navpično togost sten (tj. nizka vrednost parametra  $e_1$ ), učinki, ki povečujejo strižno togost sten (tj. visoka vrednost parametra  $g_1$ ), in učinki, ki zmanjšujejo strižno togost etažnih plošč (tj. nizka vrednost parametra  $g_2$ ). Vendar pa verjetnostna analiza daje dodatno zaupanje v obstoječo rešitev. Posteriorna porazdelitev teh



parametrov kaže, da so omenjeni učinki močni, medtem ko učinki, opisani s parametroma  $e_2$  in  $e_3$ , niso pomembni. Poleg tega je iz korelacije med parametroma  $e_3$  in  $g_2$  razvidno, da bi lahko nizke vrednosti parametra  $e_3$  le nadomestile učinek, ki ga zajema parameter  $g_2$  (gre za parametra, ki učinkujeta na togost istih elementov). Tudi korelacija med parametri  $e_1$ ,  $g_1$  in  $g_2$  je informativna. Nazadnje, parameter  $q$ , ki prestavlja negotovost mase, je znotraj razumnih meja v obeh analizah. Za nadaljnjo razpravo o učinkih glej [1].



Slika 3: Postopek posodabljanja modela po verjetnostnem pristopu.



**Slika 4:** Primerjava rezultatov determinističnega posodabljanja (križci) s posteriorno porazdelitvijo verjetnosti lastnih frekvenc. Rezultati so prikazani v odstotkovni razliki od eksperimentalno določenih lastnih frekvenc.

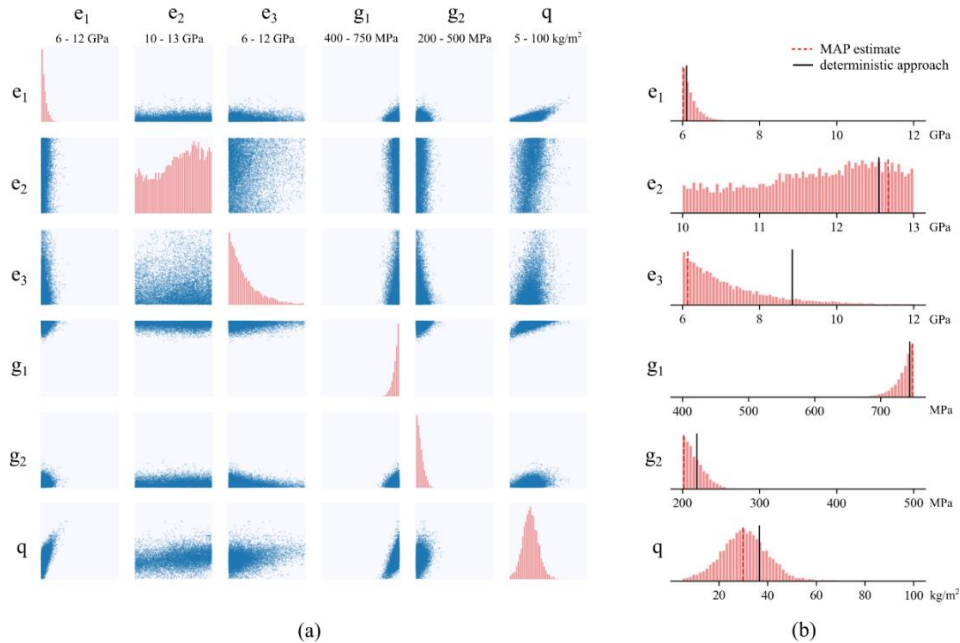
Ključna prednost Bayesovega pristopa pri analizi rezultatov je večje zaupanje v rezultate. Glede na varianco vzorčne porazdelitve posameznega parametra se lahko sklepa o njegovem vplivu in pomembnosti. Iz prikazanih rezultatov se zlahka določi parametre, ki imajo zanemarljiv vpliv, s čimer njihova posodobljena vrednost ne posreduje uporabnega znanja. V našem primeru je to parameter  $e_2$  (in deloma  $e_3$ ). Druga prednost je, da imamo vpogled v interakcijo med parametri (kot na primer med  $e_1$  in  $q$ , pa tudi med  $e_1$ ,  $g_1$  in  $g_2$ ). Zaradi hitrejšega izračuna je bil postavljen nadomestni model, ki je omogočal tudi izračun občutljivostne analize in kvantifikacije negotovosti. Ti dve analizi skupaj s posodabljanjem modela poglobita razumevanje vpliva med vhodnimi in izhodnimi parametri in pomagata razviti kritičen odnos do rezultatov posodabljanja.

## 6 Diskusija

Z verjetnostnim pristopom k posodabljanju numeričnega modela dobimo širše razumevanje problema kot z determinističnim. Dobimo več zaupanja v rezultate ter imamo vpogled v vpliv posameznih parametrov na odziv modela. Tudi bolje razumemo, ali obstajajo kakšne interakcije med posameznimi vhodnimi parametri.

Pri izvedbi verjetnostnega posodabljanja (sploh z uporabo nadomestnega modela) pa se soočimo z marsikaterimi izzivi. Prvi je definicija apriorne verjetnosti vhodnih parametrov. Čim bolj točno mora odražati negotovost, ki jo imamo pri poznavanju vrednosti vhodnih parametrov. Prav tako je potrebno oceniti negotovost eksperimentalnih podatkov v definiciji funkcije verjetja. Izbira teh dve verjetnosti močno vpliva na končen rezultat, zato je potrebno to definirati skrbno. Zaradi potrebe po velikem številu izračunov časovno zahtevnega numeričnega modela je pogosto smiselno definirati nadomestni model. V predstavljeni študiji primera se je pri tem pojavilo par izzivov. Najizrazitejši je bil z razvrščanjem lastnih oblik. MAC kriterij ni uspel ustrezno razvrstiti lastnih oblik za celotno območje vhodnih parametrov (tudi zaradi premajhnega števila prostostnih stopenj). Težava je bila tudi postaviti nadomestni model za MAC vrednosti lastnih oblik (verjetno zaradi preveč nelinearnega obnašanja). Za

lastne oblike se je zato postavil nadomestni model po posameznih komponentah lastnih vektorjev. To se je izkazalo za precej boljši pristop. V splošnem se je predstavljen verjetnostni pristop izkazal za časovno bolj zahtevnega (tako v pogledu računskega časa kot tudi časa porabljenega za implementacijo problema). Hkrati pa je pripomogel k precej širšemu razumevanju problema.



**Slika 5:** Primerjava rezultatov determinističnega in Bayesovega posodabljanja s pomočjo prikaza vzorcev posteriorne porazdelitve vhodnih parametrov.

## Literatura

- [1] B. Kurent, B. Brank, W.K. Ao, *Model updating of seven-storey cross-laminated timber building designed on frequency-response-functions-based modal testing*, Structure and Infrastructure Engineering, DOI: [10.1080/15732479.2021.1931893](https://doi.org/10.1080/15732479.2021.1931893), 2021.
- [2] B. Kurent, N. Friedman, B. Brank, W.K. Ao, *Bayesian updating of tall timber building model using modal data*, Engineering Structures [v tisku], 2022.
- [3] H.G. Matthies, E. Zander, B. Rosic, A. Litvinenko, and O. Pajonk, In: *Computational Methods for Solids and Fluids. Computational Methods in Applied Sciences, volume 41, chapter Inverse Problems in a Bayesian Setting*, pages 245--286, Springer, Cham., 2016.
- [4] D. Xiu, G. E. Karniadakis, *The wiener-asky polynomial chaos for stochastic differential equations*. SIAM Journal on Scientific Computing, 24(2):619--644, 2002.



## *Osnosimetrični celični avksetični metamaterial*

*Anja Mauko<sup>1</sup>, Miran Ulbin<sup>1</sup>, Nejc Novak<sup>1</sup>, Matej Vesenjaka<sup>1</sup> in Zoran Ren<sup>1</sup>*

### *Axisymmetric cellular auxetic metamaterial*

**Povzetek.** Na podlagi preteklih raziskav je bil razvit in patentiran nov osnosimetričen celičen avksetični metamaterial, ki temelji na prostorski preslikavi kiralne enotske celice. V programskem jeziku Python je bil razvit algoritem za parametrično modeliranje osnosimetričnega metamateriala. Algoritem omogoča izgradnjo različnih struktur novega metamateriala, tudi gradiranih, s prilagajanjem vhodnih parametrov. Izvedena je bila začetna mehanska karakterizacija vzorcev razvitega metamateriala, izdelanih iz nerjavnega jekla 316L z dodatno tehnologijo. Tlačni preizkusi vzorcev pri različnih obremenitvenih režimih so dokazali izboljšanje togosti, sposobnosti absorpcije energije in avksetičnosti osnosimetričnega metamateriala pri višjih deformacijskih hitrostih.

**Abstract.** Based on past research, a new axisymmetric cellular auxetic metamaterial constructed on the spatial mapping of a chiral unit cell has been developed and patented. An algorithm for parametric modelling of axisymmetric metamaterial was developed in the Python programming language. The algorithm enables the construction of various new metamaterial structures, including graded ones, by adjusting the input parameters. Initial mechanical characterization of the samples of the developed metamaterial made of 316L stainless steel with additive technology was performed. Compressive tests of the samples at different loading regimes showed an improvement in the stiffness, energy absorption capacity and auxeticity of the axisymmetric metamaterial at higher strain rates.

## 1 Uvod

V naravi se srečujemo z različnimi materiali s celičnimi strukturami, ki so zgrajeni optimalno glede na nalogo, ki jo opravljajo. Takšni naravni materiali so les, kosti, čebelji panji, stebila rastlin, spužve ipd. Na osnovi opazovanj teh naravnih materialov so bili razviti umetno ustvarjeni celični materiali (metamateriali) z izboljšanimi mehanskimi lastnostmi, kot so visoka absorpcija energije, spremenljivo Poissonovo število, nizka specifična masa ob visoki specifični togosti in izboljšane dušilne karakteristike. Prednosti celičnih metamaterialov v primerjavi s tradicionalnimi materiali, so spodbudile zanimanje in njihovo uporabo na različnih področjih, kot so medicina, letalstvo, avtomobilizem in šport.

Posebna skupina naprednih celičnih metamaterialov so avksetični metamateriali, za katere je značilno negativno Poissonovo razmerje. Takšni metamateriali se pri obremenjevanju

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

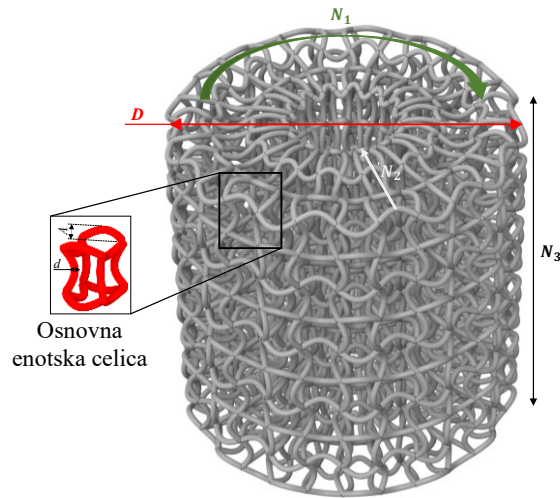
enakoznačno deformirajo v smeri obremenitve in v prečnih smereh, kar se odraža v bistveni spremembi njihovega volumna in togosti. Celična struktura avksetičnih metamaterialov je lahko prostorsko enakomerna ali spremenljiva (gradirana). Gradiranost celičnih metamaterialov lahko dosežemo s prostorsko spremenljivimi debelinami celičnih sten, spremenljivim številom in velikostjo celic. V primerjavi z enakomernimi celičnimi materiali dosegajo gradirani metamateriali nekatere izboljšane mehanske prednosti, kot so boljša udarna odpornost, izboljšana toplotna izolacija in izboljšane upogibne lastnosti [6]. V strokovni literaturi se za takšne materiale pogosto uporablja tudi izraz funkcionalno gradirani celični materiali. Gradiranost je lahko z uporabo sodobnih računalniških in proizvodnih tehnologij namensko načrtovana glede na izbrano funkcijo materiala. Z natančno zasnovo in izgradnjo celične strukture z uporabo metodologij računalniško podprtega inženirstva materialov (CME – Computational Materials Engineering) dosegamo pri gradiranih metamaterialih prostorsko spremenljive mehanske lastnosti.

Večina do sedaj razvitih avksetičnih struktur, kot so 2D satovja, 3D avksetične strukture in razni kompoziti [9], imajo ortotropne mehanske materialne lastnosti. Osnosimetrične strukture in strukture s krožnimi prerezi se v naravi pojavljajo v obliki gradiranih poroznih materialov [2], [11]. Večina do sedaj zasnovanih osnosimetričnih avksetičnih struktur je bilo razvitih s preslikavo dvodimenzionalne avksetične geometrije na površino oz. plašč valja [5], [10]. V okviru laboratorija za zahtevne inženirske simulacije in eksperimentiranje (LACE-X) na Fakulteti za strojništvo, Univerze v Mariboru, je bil na podlagi pretekle raziskave [8] zasnovan inovativen osnosimetričen avksetičen metamaterial, ki temelji na periodični prostorski preslikavi enotske štiri-kiralne celice. Zasnova novega metamateriala je bila izvedena z razvojem lastnega algoritma za parametrično modeliranje, ki omogoči izgradnjo različnih strukturnih kombinacij novega metamateriala.

## **2 Postopek izgradnje osnosimetrične kiralne avksetične strukture**

Zasnova novega osnosimetričnega celičnega metamateriala izhaja iz preteklih raziskav v Laboratoriju za zahtevne inženirske simulacije in eksperimentiranje (LACE-X) na Fakulteti za strojništvo, Univerze v Mariboru [1], [3]. Glavna značilnost novega inovativnega metamateriala je osnosimetrična kiralna struktura zgrajena iz enotske štiri-kiralne celice, ki je v prostoru preslikana v radialni in obodni smeri. Nova osnosimetrična avksetična kiralna struktura je v postopku Evropske patentne zaščite [7]. Za razvoj geometrije strukture celičnega metamateriala je bil razvit algoritem za parametrično modeliranje v programskem jeziku Python. Slednji je bil uporabljen v programskem paketu Ansys Spaceclaim, v katerem je bil izveden postopek parametričnega modeliranja za izgradnjo volumskega modela. Z uporabo parametričnega modeliranja je omogočeno enostavno kreiranje osnosimetričnih kiralnih struktur različnih geometrij in velikosti.

Geometrija osnosimetričnega celičnega avksetičnega metamateriala temelji na štiri-kiralni kvadratni enotski celici, razviti na podlagi analize lastnih frekvenc rešetkaste strukture, podrobneje predstavljene v delu [8]. Trodimenzionalna geometrija enotske celice temelji na sinusno konkavno ali konveksno ukrivljenih robovih celice, ki se stikajo v celičnih vozliščih.



**Slika 1:** Ponazoritev osnovnih parametrov za izgradnjo volumskega modela celičnega metamateriala s postopkom parametričnega modeliranja.

Novi osnosimetrični metamaterial je globalno valjčne oblike, znotraj katerega je zgrajena struktura celičnega metamateriala, sliki 1 in 2. Algoritem za izgradnjo volumskega modela celičnega metamateriala je zapisan tako, da je najprej potrebno definirati vrednosti vhodnih parametrov. Vhodni parametri so deljeni v dve skupini, osnovni in skalirni parametri. Z osnovnimi parametri je določena osnovna enotska celica, med tem ko je s skalirnimi parametri določena gradiranost strukture. Osnovni parametri, prikazani na sliki 1, so:

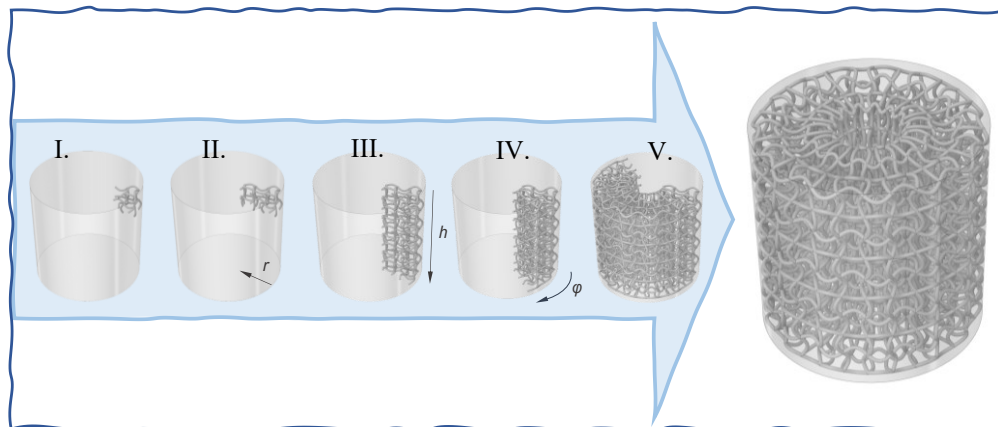
- premer preizkušanca  $D$ ,
- število celic po obodu preizkušanca  $N_1$ ,
- število celic po radiju preizkušanca  $N_2$ ,
- število celic po višini preizkušanca  $N_3$ ,
- premer medvozlíščnih povezav  $d$ ,
- amplituda medvozlíščnih povezav osnovne enotske celice  $A$ .

Skalirni parametri so:

- skalirni faktor premera medvozlíščnih povezav v radialni smeri  $d_r$ ,
- skalirni faktor premera medvozlíščnih povezav po višini preizkušanca  $d_v$ ,
- skalirni faktor amplitude medvozlíščnih povezav v radialni smeri  $A_r$ ,
- skalirni faktor amplitude medvozlíščnih povezav po višini preizkušanca  $A_v$ .

Slika 2 prikazuje izgradnjo volumskega modela osnosimetrične kiralne avksetične strukture celičnega metamateriala. V algoritmu za razvoj volumskega modela je bila najprej izgrajena osnovna enotska štiri-kiralna celica, prikazana na sliki 1. Osnovna enotska celica je bila ustvarjena na zunanjem delu navideznega valja (korak I.) in je sestavljena iz radialnih, obodnih in osnih medvozlíščnih povezav. Geometrija osnovne enotske celice je določena s parametri  $D$ ,  $N_1$ ,  $d$  in  $A$ . S parametroma  $D$  in  $N_1$  je bila določena enaka dolžina skrajnih zunanjih radialnih, obodnih in osnih medvozlíščnih povezav, s parametrom  $A$  pa je bila določena njihova ukrivljenost. Medvozlíščne povezave so konstantne krožne oblike. V II. koraku je bil ustvarjen prvi radialni celični sloj ( $r$ ). Število radialnih celičnih slojev je bilo določeno s

parametrom  $N_2$ . Zaradi zmanjševanja obsega radialnih celičnih plasti v notranjost navideznega valja, je bila samodejno skalirana amplituda radialnih medvozlščnih povezav, med tem ko je geometrija obodnih in osnih medvozlščnih povezav ostala nespremenjena. V III. koraku je bil ustvarjen radialni celični sloj kopiran v osni smeri ( $h$ ) valja. S tem je bil izgrajen osni celični sloj v obliki krožnega loka, katerega višina je bila določena neposredno s parametrom  $N_3$ . V zadnjih korakih je bil ustvarjen osni celični sloj kopiran v obodni smeri ( $\varphi$ ) navideznega valja. S tem je bila zaključena izgradnja osnosimetričnega modela avksetičnega celičnega metamateriala. V opisanem postopku izgradnje volumskega modela niso bili upoštevani skalirni faktorji za gradiranost strukture.



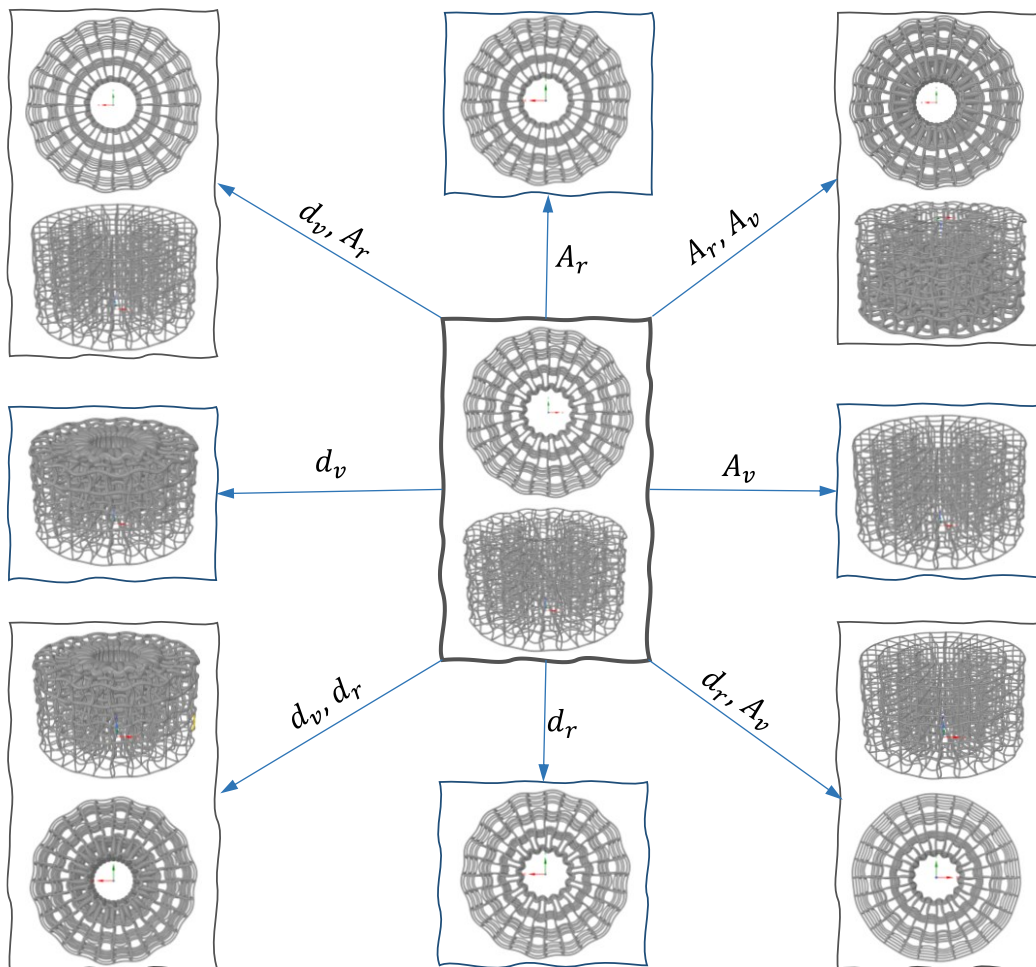
**Slika 2:** Postopek izgradnje volumskega modela osnosimetričnega kiralnega metamateriala znotraj navideznega valja.

Zapisan algoritem za parametrično modeliranje prav tako omogoča izgradnjo gradiranih volumskih modelov na različne načine. Gradiranost strukture je dosežena z določitvijo skalirnih parametrov. Glede na predpis različnih kombinacij skalirnih parametrov je mogoče doseči 15 različnih načinov gradiranosti volumskega modela z enakimi vrednostmi osnovnih parametrov oz. z enako osnovno enotsko celico. Na sliki 3 so prikazane samo nekatere izmed možnih gradiranosti strukture z enako enotsko celico in predpisom enega ali dveh skalirnih faktorjev. V središču slike 3 je prikazan model negradirane strukture, nato pa so na robovih slike prikazane različne kombinacije gradiranosti. Enotska celica je bila določena s vhodnimi parametri, katerih vrednosti so zapisane v tabeli 1. Različne gradiranosti volumskih modelov so nato bile dosežene z izbiro različne kombinacije skalirnih parametrov.

**Tabela 1:** Vrednosti vhodnih parametrov volumskih modelov različnih gradiranosti z enako osnovno enotsko celico.

<b>OSNOVNI PARAMETRI</b>					
$D$	$N_1$	$N_2$	$N_3$	$d$	$A$
36 mm	28	3	5	0,35	0,4
<b>SKALIRNI PARAMETRI</b>					
$A_r$	$A_v$	$d_r$	$d_v$		
0,5	0,5	1,5	1,5		





Slika 3: Volumski modeli osnosimetričnega metamateriala različnih gradiranosti z enako osnovno enotsko celico.

### 3 Izdelava preizkušancev in osnovna mehanska karakterizacija

Za osnovno mehansko karakterizacijo so bili izdelani preizkušanci osnosimetričnega celičnega avksetičnega metamateriala iz nerjavnega jekla 316L z napredno dodajalno tehnologijo PBF, ki temelji na metodi fuzije prahu. Izdelani vzorci so bili naknadno peskani z visokotlačnim zrakom za odstranitev preostalega proizvodnega prahu. Slika 4 prikazuje geometrijo izdelanega preizkušanca. Geometrija preizkušancev je bila prilagojena glede na omejitve proizvodne metode in uporabljenih eksperimentalnih preizkuševališč. V tabeli 2 so podane osnovne geometrijske in materialne lastnosti preizkušancev. Preizkušanci so imeli negradirano strukturo (brez predpisa skalirnih parametrov), saj je bil cilj obravnavane raziskave izključno začetna mehanska karakterizacija novega metamateriala. Vpliv gradiranosti osnosimetričnega metamateriala bo obravnavan v prihodnjih raziskavah.





**Slika 4:** Preizkušavec novega osnosimetričnega celičnega avksetičnega metamateriala.

**Tabela 2:** Osnovne materialne in geometrijske vrednosti izdelanih preizkušancev.

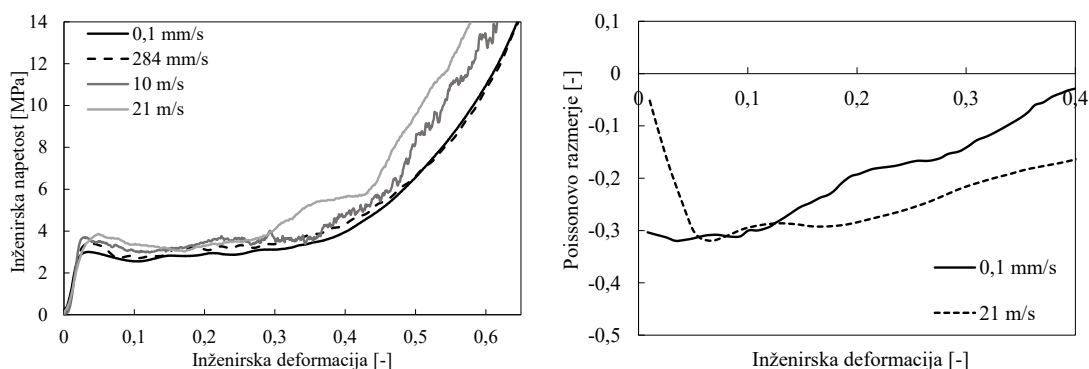
Dimenzije [mm]		Masa [g]	Relativna gostota [%]	Poroznost [%]	
Ø21×21		4,37	8,50	91,5	
<i>OSNOVNI PARAMETRI</i>					
$D$	$N_1$	$N_2$	$N_3$	$d$	$A$
20 mm	28	3	9	0,35	0,5

Osnovna mehanska karakterizacija osnosimetričnega metamateriala je bila izvedena na preizkuševalnem stroju INSTRON 8801 v kvazi-statičnem režimu pri hitrostih pomika čeljusti 0,1 mm/s in 284 mm/s pri konstantni sobni temperaturi 22 °C. Eksperimentalni pogoji so bili enaki v vseh preizkusih. Za določitev vpliva deformacijske hitrosti so bili izvedeni dinamični preizkusi pri hitrostih 10 m/s in 21 m/s na preizkuševališču direktnega udarca (DIHB), katerega lastnosti in delovanje sta natančneje opisana v delu [4]. Za doseganje ponovljivosti eksperimentalnih rezultatov so bili pri vseh hitrostih izvedeni po trije preizkusi. Vsi preizkusi so bili opazovani z visokohitrostno digitalno kamero Photron FASTCAM SA-Z pri hitrosti zajemanja slik 70 000 fps in slikovni resoluciji 640 × 280 px. Digitalna korelacija slik visokohitrostnih posnetkov je bila uporabljena za določitev inženirske napetosti in specifičnih deformacij, Poissonovega razmerja in preučitev poteka deformacijskih front.

Eksperimentalni rezultati so predstavljeni na sliki 5, ki prikazuje graf povprečij inženirskih napetosti v odvisnosti od inženirske deformacije in graf Poissonovih razmerij v odvisnosti od inženirske deformacije pri različnih hitrostih obremenjevanja. Rezultati kažejo naraščanje togosti celičnega metamateriala z naraščanjem deformacijske hitrosti. Naraščanje togosti je posledica vpliva mikrovztrajnosti, ki nastopi pri prehodu v dinamični obremenitveni režim. Z višanjem deformacijske hitrosti je prav tako narasla sposobnost absorpcije energije za 22 %. Pri hitrostih 0,1 mm/s, 284 mm/s in 10 m/s so bile prve deformacije zaznane na prosti strani preizkušanca v obliki strižne ravnine in so potovale proti udarni strani preizkušanca. Takšen način deformacije je značilen za kvazi-statičen obremenitveni režim. V primeru udarne hitrosti 21 m/s so prve deformacije prisotne v drugi in tretji celični plasti na udarni strani, ki se nato

širijo na prosto stran preizkušanca. Takšen način deformacije nakazuje na prehod v visokohitrostni deformacijski način, vendar pa še ni bilo zaznane izrazite lokalizirane deformacijske fronte na udarni strani preizkušanca. To nakazuje, da je bil pri hitrosti 21 m/s dosežen prehodno dinamičen obremenitveni režim.

Na desnem grafu so prikazane povprečne krivulje Poissonovih razmerij v odvisnosti od inženirske deformacije. Pri tem so predstavljeni samo rezultati najnižje in najvišje hitrosti, saj so bili rezultati preizkusov pri vmesnih hitrostih podobni rezultatom hitrosti 0,1 mm/s, ki poteka v enakem obremenitvenem režimu. Vsi preizkušanci osnosimetričnega metamateriala so izkazovali avksetičen odziv. Pri hitrosti 0,1 mm/s je Poissonovo razmerje najprej padalo vse do vrednosti -0,32, nato pa postopno naraščalo do pozitivne vrednosti ob koncu deformacije. Pri hitrosti 21 m/s je bila začetna vrednost Poissonovega razmerja najnižja s -0,32 in je nato postopoma naraščala z deformacijo. Pri povišani hitrosti 21 m/s Poissonovo razmerje ni preseglo nične vrednosti.



**Slika 5:** Rezultati kvazi-statičnih in dinamičnih preizkusov osnosimetričnega metamateriala: a) povprečne vrednosti razmerja inženirske napetosti in inženirske deformacije in b) potek Poissonovih razmerij.

## 4 Zaključek

V raziskavi je bil obravnavan inovativen osnosimetrični celični avksetični metamaterial, ki temelji na prostorski preslikavi kiralne enotske celice v radialni in obodni smeri. Razvit je bil algoritem za zasnovo volumskega modela osnosimetričnega celičnega metamateriala v programskem jeziku Python. Za parametrično modeliranje in izgradnjo volumskega modela je bil uporabljen program Ansys Spaceclaim.

Izvedena je bila začetna študija mehanskega odziva osnosimetričnega metamateriala v različnih obremenitvenih režimih. Ugotovljeno je bilo naraščanje togosti osnosimetričnega metamateriala ob naraščanju deformacijske hitrosti. Izboljšanje materialnih lastnosti je posledica vpliva mikrovztrajnosti, ki nastopi šele v dinamičnem obremenitvenem režimu. Avksetičen odziv je bil izrazitejši pri povišani deformacijski hitrosti, kar potrjuje izboljšan odziv osnosimetričnega metamateriala pri višjih deformacijskih hitrostih.

## Literatura

- [1] A. Airoidi, N. Novak, F. Sgobba, A. Gilardelli, and M. Borovinšek. Foam-filled energy absorbers with auxetic behaviour for localized impacts. *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 788, 2020.
- [2] A. Ghazlan, T. Ngo, P. Tan, Y. M. Xie, P. Tran, and M. Donough. Inspiration from Nature's body armours – A review of biological and bioinspired composites. *Compos. Part B*, 2020.
- [3] A. Mauko *et al.* Dynamic Deformation Behaviour of Chiral Auxetic Lattices at Low and High Strain-Rates. *Metals (Basel)*, vol. 11, no. 1, p. 52, Dec. 2020.
- [4] A. Mauko, Y. E. Yilmaz, and Z. Ren. High-speed impact testing on DIHB with implementation of wave separation technique. *Kuhljevi dnevi 2021*, pp. 135–142, 2021.
- [5] C. Luo, C. Z. Han, X. Y. Zhang, X. G. Zhang, X. Ren, and Y. M. Xie. Design, manufacturing and applications of auxetic tubular structures: A review. *Thin-Walled Struct.*, vol. 163, p. 107682, 2021.
- [6] J. Zhang, Z. Wang, and L. Zhao. Dynamic response of functionally graded cellular materials based on the Voronoi model. *Compos. Part B Eng.*, 2015.
- [7] M. Vesenjajk, N. Novak, and Z. Ren. Axisymmetric chiral auxetic structure, EP21197296.3 patent pending. 2021.
- [8] N. Novak, L. Starčević, M. Vesenjajk, and Z. Ren. Blast response study of the sandwich composite panels with 3D chiral auxetic core. *Compos. Struct.*, vol. 210, pp. 167–178, 2019..
- [9] T. Fíla *et al.* Impact Behavior of Additively Manufactured Stainless Steel Auxetic Structures at Elevated and Reduced Temperatures. *Adv. Eng. Mater.*, vol. 23, no. 1, p. 2000669, 2021.
- [10] W. Wu *et al.* Mechanical properties of hierarchical anti-tetrachiral metastructures. *Extrem. Mech. Lett.*, vol. 16, pp. 18–32, 2017.
- [11] Z. Liu, M. A. Meyers, Z. Zhang, and R. O. Ritchie. Functional gradients and heterogeneities in biological materials: Design principles, functions, and bioinspired applications. *Prog. Mater. Sci.*, vol. 88, pp. 467–498, 2017.



## *Približni izračun efektivnih kubičnih strižnih modulov*

George Mejak<sup>1</sup>

### *Approximation of the effective cubic shear moduli*

**Povzetek.** Izpeljana je izboljšana Hashin Shtrikmanova ocena za efektivne strižne module materiala s kubično simetrijo osnovne celice. Na osnovi razlike med osnovno in izboljšano Hashin Shtrikmanovo oceno je nato izračunan približek efektivnih modulov. Kvaliteta približka je ponazorjena s primerom.

**Abstract.** Improved Hashin Shtrikman bounds on the effective shear moduli for composite materials with cubic symmetry are derived. Using the improved and classical bounds the approximation of shear moduli is constructed. Quality of the approximation is assessed by an example.

## 1 Uvod

Hashin Shtrikmanove ocene omejujejo vrednosti efektivnih elastičnih modulov. Za materiale z izrazito različnimi materialnimi fazami so te meje lahko zelo vsaksebi. Boljšo aproksimacijo lahko seveda dobimo z numeričnim izračunom. Z numeričnim izračunom pa izgubimo splošnost, saj za numerični izračun potrebujemo konkretne vrednosti materialnih parametrov.

Naš namen v tem prispevku je predstaviti seminumerični pristop. Izpeljali bomo formulo v zaprti obliki za približno določitev strižnih modulov. V formuli nastopajo koeficienti, ki so odvisni od geometrije osnovne celice, in so hkrati neodvisni od materialnih lastnosti. Po numeričnem izračunu koeficientov dobimo formulo v kateri lahko brez težav spreminajmo materialne parametre in z njeno pomočjo parametrično analiziramo vpliv materialnih parametrov na efektivne lastnosti.

## 2 Hashin Shtrikmanov variacijski princip

Naj bo  $Y = [-\pi, \pi]^3 \subset \mathbb{R}^3$  osnovna celica dvofaznega kompozita s periodično strukturo. Z  $Y_1$  in  $Y_2$  označimo njuni fazi,  $\bar{Y}_1 \cup \bar{Y}_2 = \bar{Y}$ . Privzeli bomo, da ima  $Y$  kubično simetrijo. To pomeni,

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za matematiko in fiziko

da je  $QY = Y$  za vsak  $Q$  iz oktahedralne grupe rotacije  $\mathcal{O}$ . Elastični tenzor  $\underline{\underline{C}}$  naj bo odsekoma konstanten z vrednostjo  $\underline{\underline{C}}_i$  na fazi  $Y_i$ . Privzeli bomo, da sta  $\underline{\underline{C}}_i$  izotropična tenzorja in da je  $\underline{\underline{C}}_2 > \underline{\underline{C}}_1$  <sup>2</sup> oziroma, da je  $\underline{\underline{C}}_2 \neq \underline{\underline{C}}_1$  in  $(\kappa_2 - \kappa_1)(\mu_2 - \mu_1) \geq 0$ . Tu so  $\kappa_i$  in  $\mu_i$  elastične konstante tenzorjev  $\underline{\underline{C}}_i$ ,  $i = 1, 2$ . Primer, ko ne velja  $\underline{\underline{C}}_2 > \underline{\underline{C}}_1$  je obravnavan v [5].

Izhodišče za Hashin Shtrikmanove ocene, v nadaljevanju HS ocene, je HS variacijski princip

$$\underline{\underline{e}}_b : \underline{\underline{C}}_1 : \underline{\underline{e}}_b + \max_{\underline{\underline{p}} \in \mathbb{I}_{\#}^2(Y_2)} J_1(\underline{\underline{p}}, \underline{\underline{e}}_b) = \underline{\underline{e}}_b : \underline{\underline{C}}_e : \underline{\underline{e}}_b = \underline{\underline{e}}_b : \underline{\underline{C}}_2 : \underline{\underline{e}}_b + \min_{\underline{\underline{p}} \in \mathbb{I}_{\#}^2(Y_1)} J_2(\underline{\underline{p}}, \underline{\underline{e}}_b), \quad (1)$$

ki velja za poljubni homogeni simetrični tenzor  $\underline{\underline{e}}_b$  drugega reda, za podrobnosti glej [4]. V (1) je  $\mathbb{I}_{\#}^2(Y_i)$  prostor periodičnih s kvadratom sumabilnih simetričnih tenzorjev drugega reda z nosilcem v  $Y_i$ ,  $J_1$  in  $J_2$  pa sta funkcionala

$$J_1(\underline{\underline{p}}, \underline{\underline{e}}_b) = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_2} \left( 2\underline{\underline{p}} : \underline{\underline{e}}_b - \underline{\underline{p}} : (\underline{\underline{C}}_2 - \underline{\underline{C}}_1)^{-1} : \underline{\underline{p}} + \underline{\underline{p}} : \mathcal{P}_1 \underline{\underline{p}} \right) dy \quad (2)$$

and

$$J_2(\underline{\underline{p}}, \underline{\underline{e}}_b) = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_1} \left( 2\underline{\underline{p}} : \underline{\underline{e}}_b - \underline{\underline{p}} : (\underline{\underline{C}}_1 - \underline{\underline{C}}_2)^{-1} : \underline{\underline{p}} + \underline{\underline{p}} : \mathcal{P}_2 \underline{\underline{p}} \right) dy. \quad (3)$$

Tenzor  $\underline{\underline{p}}$ , ki minimizira oziroma maksimizira, imenujemo polarizacijski tenzor. V definiciji funkcionalov nastopa Hillov operator  $\mathcal{P}_i : \mathbb{I}_{\#}^2(Y_i) \rightarrow \mathbb{I}_{\#}^2(Y_i)$ , ki poljuben  $\underline{\underline{p}}$  preslika v

$$(\mathcal{P}_i \underline{\underline{p}})(\underline{\underline{y}}) = \sum_{\underline{\underline{m}} \neq 0} \underline{\underline{K}}_i(\underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) e^{i\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{y}}}, \quad \underline{\underline{y}} \in Y. \quad (4)$$

V (4) je  $\underline{\underline{m}} \in \mathbb{Z}^3$ ,  $\underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}})$  Fourierov koeficient funkcije  $\underline{\underline{p}}$ , tenzor  $\underline{\underline{K}}_i(\underline{\underline{m}})$  pa je tenzor četrtega reda

$$\underline{\underline{K}}_i(\underline{\underline{m}}) = \frac{1}{2\mu_i(1 - \nu_i) |\underline{\underline{m}}|^4} \underline{\underline{m}} \otimes \underline{\underline{m}} \otimes \underline{\underline{m}} \otimes \underline{\underline{m}} - \frac{1}{\mu_i |\underline{\underline{m}}|^2} \underline{\underline{m}} \hat{\otimes}_i \hat{\otimes} \underline{\underline{m}}. \quad (5)$$

Tu smo z operatorjem  $\hat{\otimes}$  zapisali simetrični tenzorski produkt. Z upoštevanjem (3) in lastnosti  $\underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) = -\underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}})$  hitro vidimo, da je

$$\frac{1}{|Y|} \int_{Y_1} \underline{\underline{p}} : \mathcal{P}_2 \underline{\underline{p}} dy = \sum_{\underline{\underline{m}} \neq 0} \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) : \underline{\underline{K}}_i(\underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}). \quad (6)$$

Če v (1) variacijo s prostora  $\mathbb{I}_{\#}^2(Y_i)$  zožimo na njegov podprostor, enakosti postaneta neenakosti. Leva stran je potem spodnja meja, desna pa zgornja meja.

## 2.1 Oktahedralna aproksimacija

Variacijo v (1) omejimo na oktahedralno invariantne tenzorje, velja naj torej  $\underline{\underline{p}}(Q\underline{\underline{y}}) = \underline{\underline{p}}(\underline{\underline{y}})$  za vsak  $Q \in \mathcal{O}$ . Potem brez težav vidimo, da je  $\underline{\underline{c}}(Q\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) = \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}})$  in zato

$$\sum_{\underline{\underline{m}} \neq 0} \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) : \underline{\underline{K}}_i(\underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) = \sum_{\underline{\underline{m}} \neq 0} \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}) : \underline{\underline{K}}_i(Q\underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{c}}(\underline{\underline{m}}, \underline{\underline{p}}). \quad (7)$$

<sup>2</sup> Po definiciji je  $\underline{\underline{C}}_2 > \underline{\underline{C}}_1$ , če so vse lastne vrednosti  $\underline{\underline{C}}_2$  večje od  $\underline{\underline{C}}_1$ .

Tenzor  $\underline{\underline{K}}(\underline{m})$  lahko torej v primeru oktahedralne aproksimacije nadomestimo z njegovo kubično simetrizacijo  $\hat{\underline{\underline{K}}}_i(\underline{m}) = \sum_{Q \in \mathcal{O}} \underline{\underline{K}}_i(Q\underline{m})$ . Od sedaj naprej bomo tam, kjer ne bo pomembno, pisavo indeksa  $i$  pri tenzorju  $\hat{\underline{\underline{K}}}_i(\underline{m})$  opustili.  $\hat{\underline{\underline{K}}}(\underline{m})$  je kubični tenzor, velja  $Q * \hat{\underline{\underline{K}}}(\underline{m}) = \hat{\underline{\underline{K}}}(\underline{m})$  za vsak  $Q \in \mathcal{O}$ . Tu smo s  $Q*$  zapisali Rayleighov produkt [1].

V nadaljevanju bomo uporabili spektralno dekompozicijo kubičnega tenzorja četrtega reda [6]. Potem je  $\underline{\underline{K}}(\underline{m}) = \sum_{s=1}^3 k_s(\underline{m}) \underline{\underline{W}}_s$ , kjer je

$$\underline{\underline{W}}_1 = \underline{w}_1 \otimes \underline{w}_1, \quad \underline{\underline{W}}_2 = \underline{w}_2 \otimes \underline{w}_2 + \underline{w}_3 \otimes \underline{w}_3, \quad \underline{\underline{W}}_3 = \sum_{r=4}^6 \underline{w}_r \otimes \underline{w}_r, \quad (8)$$

in

$$\underline{w}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \underline{e}_i \otimes \underline{e}_i, \quad \underline{w}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 - \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2), \quad \underline{w}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2 - 2\underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3) \quad (9)$$

$$\underline{w}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\underline{e}_2 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_2), \quad \underline{w}_5 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_1), \quad \underline{w}_6 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1).$$

Velja očitno  $\underline{w}_i : \underline{w}_j = \delta_{ij}$  in  $\underline{\underline{K}}(\underline{m}) : \underline{w}_1 = k_1(\underline{m}) \underline{w}_1$ ,  $\underline{\underline{K}}(\underline{m}) : \underline{w}_r = k_2(\underline{m}) \underline{w}_r$  za  $r = 2, 3$  in  $\underline{\underline{K}}(\underline{m}) : \underline{w}_r = k_3(\underline{m}) \underline{w}_r$  za  $r = 4, 5, 6$ . Iz (5) in kubične simetrizacije tenzorja  $\underline{\underline{K}}(\underline{m})$  sledi, da so lastne vrednosti  $k_s$  enake

$$k_1 = \frac{2v_i - 1}{6\mu_i(1 - v_i)}, \quad k_2(\underline{m}) = \frac{2v_i - 1}{6\mu_1(1 - v_i)} - \frac{b(\underline{m})}{2\mu_i(1 - v_i)}, \quad k_3(\underline{m}) = -\frac{1}{3\mu_i} + \frac{b(\underline{m})}{3\mu_i(1 - v_i)}, \quad (10)$$

kjer je  $b(\underline{m}) = (m_1^2 m_2^2 + m_1^2 m_3^2 + m_2^2 m_3^2) / |\underline{m}|^4$ . V polni pisavi so koeficienti  $k_s$  odvisni še od indeksa  $i$ .

Stacionarna enačba za funkcional  $J_1$  je

$$0 = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_2} \left( \underline{e}_b - \underline{p} : (\underline{C}_2 - \underline{C}_1)^{-1} + \sum_{\underline{m} \neq 0} \hat{\underline{\underline{K}}}(\underline{m}) : \underline{c}(\underline{m}, \underline{p}) e^{im \cdot \underline{y}} \right) : \delta \underline{p} \, d\underline{y} \quad (11)$$

in do tod zaradi poljubne variacije  $\delta \underline{p}$

$$\underline{0} = \underline{e}_b - \underline{p} : (\underline{C}_2 - \underline{C}_1)^{-1} + \sum_{\underline{m} \neq 0} \hat{\underline{\underline{K}}}(\underline{m}) : \underline{c}(\underline{m}, \underline{p}) e^{im \cdot \underline{y}} \quad \text{za vsak } \underline{y} \in Y_2. \quad (12)$$

Ker je pri pogoju  $\underline{C}_2 > \underline{C}_1$  funkcional  $J_1$  strogo konkaven, ima (12) enolično rešitev, ki maksimizira  $J_1$  na prostoru oktahedralno invariantnih tenzorjev.

Poljubni  $\underline{p}(\underline{y})$  je oblike  $p_r(\underline{y}) \underline{w}_r$ . Potem je  $\underline{c}(\underline{m}, \underline{p}) = c(\underline{m}, p_r) \underline{w}_r$ , kjer je  $c(\underline{m}, p_r)$  Fourierov koeficient produkta funkcije  $p_r(\underline{y})$  s karakteristično funkcijo  $\chi_2$  množice  $Y_2$ . Za primer  $\underline{e}_b = \underline{w}_s$  sledi, na tem mestu bistveno uporabimo dejstvo, da je  $\hat{\underline{\underline{K}}}$  kubični tenzor, da je rešitev enačbe (12) oblike  $\underline{p} = p_s(\underline{y}) \underline{w}_s$ . V zadnjem zapisu ni vsote po indeksu  $s$ .

Tako za  $\underline{e}_b = \underline{w}_s$  sledi, da je  $p_s(\underline{y})$  rešitev enačbe

$$0 = 1 - \alpha_s p_s(\underline{y}) + \sum_{\underline{m} \neq 0} \beta_s(\underline{m}) c(\underline{m}, p_s) e^{im \cdot \underline{y}} \quad \text{za vsak } \underline{y} \in Y_2. \quad (13)$$

V zgornji enačbi je

$$\alpha_s = \underline{w}_s : (\underline{C}_2 - \underline{C}_1)^{-1} : \underline{w}_s \quad \text{in} \quad \beta_s(\underline{m}) = \underline{w}_s : \underline{\hat{K}}(\underline{m}) : \underline{w}_s. \quad (14)$$

Ker je  $\underline{\hat{K}} = \underline{\hat{K}}_i(\underline{m})$ , je polni zapis za koeficient  $\beta$  enak  $\beta_{i,s}$ . Očitno je  $\alpha_2 = \alpha_3$  in  $\alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6$ , in  $\beta_1 = k_1$ ,  $\beta_2(\underline{m}) = \beta_3(\underline{m}) = k_2(\underline{m})$  in  $\beta_4(\underline{m}) = \beta_5(\underline{m}) = \beta_6(\underline{m}) = k_3(\underline{m})$ .

Razvijmo  $p_s(\underline{y}) = \sum_{\underline{m}} c(\underline{m}, p_s) e^{i\underline{m} \cdot \underline{y}}$  in  $\chi_2 = \sum_{\underline{m}} c(\underline{m}, \chi_2) e^{i\underline{m} \cdot \underline{y}}$  v Fourierovi vrsti in ju vstavimo v (13). Dobimo

$$0 = c(\underline{0}, \chi_2) - \alpha_s c(\underline{0}, p_s) + \sum_{\underline{m} \neq \underline{0}} (c(\underline{m}, \chi_2) + (-\alpha_s + \beta_s(\underline{m})) c(\underline{m}, p_s)) e^{i\underline{m} \cdot \underline{y}} \quad \text{za vsak} \quad \underline{y} \in Y_2. \quad (15)$$

Potem so navidez

$$c(\underline{0}, p_s) = \frac{1}{\alpha_s} c(\underline{0}, \chi_2) \quad \text{in} \quad c(\underline{m}, p_s) = \frac{c(\underline{m}, \chi_2)}{\alpha_s - \beta_s(\underline{m})} \quad \text{za} \quad \underline{m} \neq \underline{0} \quad (16)$$

iskani Fourierovi koeficienti rešitve (12) za  $\underline{e}_b = \underline{w}_s$ . Vendar v resnici (16) ni prava rešitev. Pogoj, da je funkcija enaka nič na podmnožici  $Y_2 \subset Y$  ne določa enolično njene Fourierove koeficiente. Če želimo iz (13) dobiti Fourierove koeficiente  $c(\underline{m}, p_s)$ , pomnožimo (13) s  $e^{i\underline{k} \cdot \underline{y}}$  in dobljeno integriramo po  $Y_2$ . Na ta način dobimo sistem

$$0 = c(\underline{k}, \chi_2) - \alpha_s c(\underline{k}, p_s) + \sum_{\underline{m} \neq \underline{0}} \beta_s(\underline{m}) c(\underline{m}, p_s) c(\underline{k} - \underline{m}, \chi_2), \quad \underline{k} \in \mathbb{Z}^3. \quad (17)$$

Sistem (17) je neskončni linearni sistem za neznane koeficiente  $c(\underline{m}, p_s)$ . Približek dobimo, če neskončno vrsto aproksimiramo s končno vrsto. Žal pa ta pristop ni učinkovit, saj je zaradi nezveznosti karakteristične funkcije  $\chi_2$  vrsta v (17) počasi konvergentna.

### 2.1.1 Kompresijski modul

V primeru  $\underline{e}_b = \underline{w}_1$  je koeficient  $\beta_1(\underline{m}) = k_1$  neodvisen od  $\underline{m}$ . Iz (13) tako dobimo

$$0 = 1 + (k_1 - \alpha_1) p_1(\underline{y}) - c(\underline{0}, p_1). \quad (18)$$

Potemtakem je  $p_1$  konstanta in  $c(\underline{0}, p_1) = f_2 p_1$ , kjer smo z  $f_2$  označili volumenski delež  $|Y_2|/|Y|$  faze  $Y_2$ . Rešitev (18) je

$$p_1 = \frac{1}{f_2 + \alpha_1 - k_1}. \quad (19)$$

Po Clapeyronovem izreku je tako maksimum funkcionala  $J_1$  na prostoru oktahedralno invariantnih tenzorjev enak

$$J_1(p_1 \underline{w}_1, \underline{w}_1) = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_2} p_1 \underline{w}_1 : \underline{w}_1 d\underline{y} = \frac{f_2}{f_2 + \alpha_1 - k_{1,1}}. \quad (20)$$

Tu smo koeficientoma  $\alpha$  in  $k$  dodali indeks  $i$  in upoštevali, da je za funkcional  $J_1$  indeks  $i$  enak 1. Če vstavimo (20) v (1) in upoštevamo, da je  $\underline{w}_1 : \underline{C}_1 : \underline{w}_1 = 3\kappa_i$  dobimo dobro znano Hashinovo formulo [2]

$$\kappa_L = \kappa_1 + \frac{f_2}{3(f_2 + \alpha_1 - k_{1,1})} \leq \kappa_e \quad (21)$$

za spodnjo mejo efektivnega kompresijskega modula.

Podobni sklep velja tudi za funkcional  $J_2$  oziroma za zgornjo mejo. Tem mejam pravimo klasične oziroma osnovne Hashin Shtrikmanove meje. Tako smo dokazali izrek:

**Izrek 1.** Na prostoru oktahedralno invariantnih tenzorjev  $\underline{p}(Q\underline{y}) = \underline{p}(\underline{y})$ ,  $Q \in \mathcal{O}$  se Hashin Shtrikmanovi meji za kompresibilni modul sovpadata s klasičnimi mejami.

Izrek je posplošitev rezultata iz [3], kjer je univerzalnost Hashinove aproksimacije dokazana v primeru aproksimacije z radialno invariantno lastno deformacijo.

### 3 Izboljšane Hashin Shtrikmanove ocene za kubična strižna modula

Za  $\underline{e}_b = \underline{w}_s$ ,  $s \neq 1$ , je koeficient  $\beta$  odvisen od  $\underline{m}$ . Za  $s = 2, 3$  dobimo HS meje za drugi strižni modul  $\mu_e^2 = \frac{1}{2}(C_{e,1111} - C_{e,1122})$ , za  $s = 4, 5, 6$  pa za prvi strižni modul  $\mu_e^1 = C_{e,1212}$ . Ker (13) ne znamo učinkovito rešiti, se bomo omejili na odsekoma konstantno aproksimacijo  $\underline{p} = \sum_{j \in J} p_j \chi(Y_{i,j})$ , kjer je  $\cup_{j \in J} Y_{i,j} = Y_i$  disjunktna dekompozicija  $Y_i$ ,  $i = 1, 2$  in  $J$  ustrežna množica indeksov. V nadaljevanju bomo obravnavali samo primer  $i = 1$ , torej funkcional  $J_1$ . Podobna izpeljava, ki nas pripelje do zgornje meje velja za primer  $i = 2$ .

Vstavimo nastavek  $\underline{p} = \sum_j p_j \chi(Y_{2,j})$  v (13). Dobimo sistem enačb

$$0 = 1 - \alpha_s p_j + \sum_{k \in J} \sum_{\underline{m} \neq 0} \beta_s(\underline{m}) c(\underline{m}, \chi_{2,k}) p_k, \quad \underline{y} \in Y_{2,j}, \quad j \in J, \quad (22)$$

za neznane  $p_j$ . Enačbe pomnožimo s  $1/|Y|$  in integriramo po  $Y_{2,j}$ . Sistem (22) se s tem preoblikuje v

$$0 = (1 - \alpha_s p_j) f_{2,j} + \sum_{k \in J} B_{s;j,k} p_k, \quad j \in J, \quad (23)$$

kjer je

$$B_{s;j,k} = \sum_{\underline{m} \neq 0} \beta_s(\underline{m}) c(\underline{m}, \chi_{2,j}) c(\underline{m}, \chi_{2,k}) \quad \text{in} \quad f_{2,j} = \frac{|Y_{2,j}|}{|Y|}. \quad (24)$$

Iz (14) sledi, da je  $B_{2;j,k} = B_{3;j,k}$  in  $B_{4;j,k} = B_{5;j,k} = B_{6;j,k}$ . Za  $s = 2, 3$  oziroma za  $s = 4, 5, 6$  dobimo res enake ocene.

Sistem (23) je zaradi stroge konkavnosti funkcionala  $J_1$  enolično rešljiv. Njegov maksimum na množici odsekoma konstantnih oktahedralno invariantnih tenzorjev je

$$J_{1,\max} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_2} \underline{w}_s : \underline{p} \, d\underline{y} = \sum_{j \in J} p_j f_{2,j}. \quad (25)$$

Podobno dobimo

$$J_{2,\min} = \frac{1}{|Y|} \int_{Y_1} \underline{w}_s : \underline{p} \, d\underline{y} = \sum_{j \in J} p_j f_{1,j}, \quad (26)$$

kjer je  $p_j$ ,  $j \in J$ , rešitev sistema (23) za katerega v (24) uporabimo koeficiente  $\beta_{2,s}(\underline{m})$  namesto  $\beta_{1,s}(\underline{m})$ .



Za uporabo (25) in (26) moramo izračunati še vrste  $B_{s;j,k}$ . Iz (10) sledi, da moramo sešteti  $\frac{1}{2}J(J+1)$  vrst

$$b_{j,k} = \sum_{\underline{m} \neq 0} \frac{(m_1^2 m_2^2 + m_1^2 m_3^2 + m_2^2 m_3^2)}{|\underline{m}|^4} c(\underline{m}, \chi_{2,j}) c(\underline{m}, \chi_{2,k}). \quad (27)$$

Ker so Fourierovi koeficienti funkcije koncentracij  $f_{2,j}$ , je  $b_{j,k}$  funkcija z argumenti  $f_{2,j}$  in  $f_{2,k}$ .

### 3.1 Primer $|J| = 2$

Za primer  $|J| = 2$  je sistem (23) dovolj enostaven, da lahko v tem primeru pripadajoče HS meje zapišemo v zaprti obliki. V ta namen rešitev poiščemo v dveh korakih. V prvem za poljubno izbrani parameter  $\gamma$  rešitev iščemo v obliki  $p_2 = \gamma p_1$ . Spodni meji sta

$$\begin{aligned} \mu_{e,L}^1 &= \mu_1 - \frac{3a_1 g_1 \mu_1 (\mu_1 - \mu_2)}{4g_4 a_2 (\mu_1 - \mu_2) + a_1 (2g_1 (\mu_1 - \mu_2) + g_2 (\mu_1 + 2\mu_2))}, \\ \mu_{e,L}^2 &= \mu_{e,L}^1 - \frac{2g_1 (g_1 - g_2 + 5g_4) \mu_1 (\mu_1 - \mu_2)^2 (15\kappa_1 \mu_1 + 9\kappa_1^2 + 4\mu_1^2)}{\mu_2 G_1 G_2}, \end{aligned} \quad (28)$$

kjer je  $a_1 = 3\kappa_1 + 4\mu_1$ ,  $a_2 = 3\kappa_1 + \mu_1$ ,  $g_1 = (\gamma f_{2,2} + f_{2,1})^2$ ,  $g_2 = \gamma^2 f_{2,2} + f_{2,1}$ ,  $g_3 = 2\gamma f_{2,1} f_{2,2}$  in  $g_4 = \gamma^2 b_{2,2} + 2\gamma b_{1,2} + b_{1,1}$  ter

$$\begin{aligned} G_1 &= a_1 ((g_2 + 2g_3) \mu_1 + 2(g_1 - g_3)(\mu_1 - \mu_2) + (2g_2 - 2g_3) \mu_2) + 4g_4 a_2 (\mu_1 - \mu_2), \\ G_2 &= 3g_2 \kappa_1 \mu_1 - 2g_3 a_2 (\mu_1 - \mu_2) + 2(g_2 + g_4) \mu_1^2 + 2(g_1 - g_4)(\mu_1 - \mu_2) \mu_1 + 2(g_2 - g_4) \mu_2 \mu_1 \end{aligned} \quad (29)$$

V naslednjem koraku maksimiziramo dobljeni meji glede na  $\gamma$ . Za modul  $\mu_{e,L}^1$  je maksimum dosežen pri

$$\gamma_1 = \frac{4a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{1,1} f_{2,2} + f_{2,1} (a_1 (\mu_1 + 2\mu_2) f_{2,2} - 4a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{1,2})}{f_{2,1} (4a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{2,2} + a_1 (\mu_1 + 2\mu_2) f_{2,2}) - 4a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{1,2} f_{2,2}}, \quad (30)$$

za  $\mu_{e,L}^2$  pa pri

$$\gamma_2 = \frac{f_{2,1} (2a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{1,2} + \mu_1 f_{2,2} (a_1 - 2(\mu_1 - \mu_2))) - 2a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{1,1} f_{2,2}}{2a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{1,2} f_{2,2} + f_{2,1} (\mu_1 f_{2,2} (a_1 - 2(\mu_1 - \mu_2)) - 2a_2 (\mu_1 - \mu_2) b_{2,2})} \quad (31)$$

Zgornji meji dobimo tako, da indeksa 1 in 2 v materialnih modulih zamenjamo v (28) – (31), namesto  $f_{2,j}$  pa uporabimo volumenska razmerja  $f_{1,j}$ ,  $j = 1, 2$ . Za  $\gamma = 1$  dobimo seveda klasične HS ocene, ki jih označimo z  $\mu_{e,L,0}^k$  in  $\mu_{e,U,0}^k$ ,  $k = 1, 2$ .

## 4 Primer

Izboljšane HS meje bomo uporabil na primeru kocke ojačane z robnim okvirjem, glej sliko 1. Faza  $Y_2$  je tako okvir na sliki 1a, faza  $Y_1$  pa preostanek kocke. Večja je materialna razlika med fazami, večja je razlika med spodnjimi in zgornjimi HS ocenami. Zato smo izbrali primer z veliko razliko med fazama z vrednostmi  $E_1 = 3\text{GPa}$ ,  $\nu_1 = 0.35$ ,  $E_2 = 70\text{GPa}$ ,  $\nu_2 = 0.2$ .

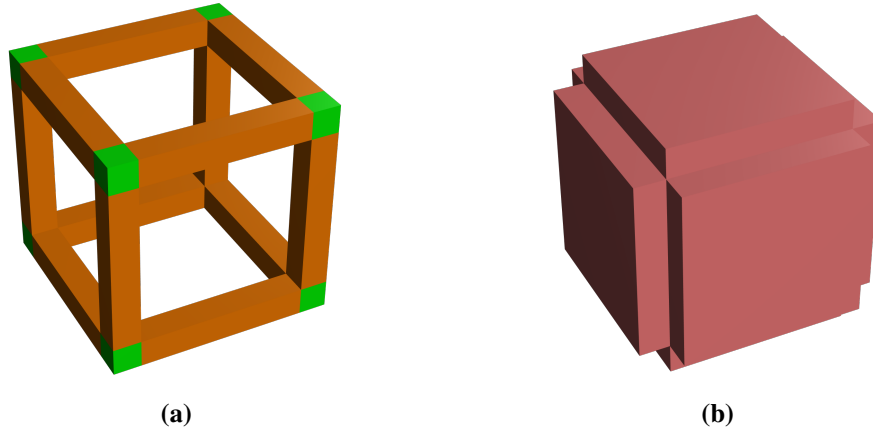
Označimo z  $\delta\pi$  brezdimenzijsko debelino okvirja. Fazo  $Y_1$  razdelimo na središčno kocko  $Y_{1,1}$  z dolžino stranice  $(1 - \delta)\pi$  in unijo šestih kvadrov dimenzije  $\delta\pi \times (1 - \delta)\pi \times (1 - \delta)\pi$ , glej sliko 1b. Relativna volumna sta  $f_{1,1} = (1 - \delta)^3$  in  $f_{1,2} = 3\delta(1 - \delta)^2$ . Pripadajoči Fourierovi koeficienti za  $m_1 m_2 m_3 \neq 0$  so

$$\begin{aligned} c_{1,1}(\underline{m}) &= -\frac{(-1)^{m_1+m_2+m_3} \sin(\pi\delta m_1) \sin(\pi\delta m_2) \sin(\pi\delta m_3)}{\pi^3 m_1 m_2 m_3}, \\ c_{1,2}(\underline{m}) &= -3c_{1,1}(\underline{m}). \end{aligned} \quad (32)$$

Za  $m_1 m_2 \neq 0$  in  $m_3 = 0$  pa

$$\begin{aligned} c_{1,1}(\underline{m}) &= -\frac{(\delta - 1)(-1)^{m_1+m_2} \sin(\pi\delta m_1) \sin(\pi\delta m_2)}{\pi^2 m_1 m_2} \\ c_{1,2}(\underline{m}) &= \frac{(3\delta - 2)(-1)^{m_1+m_2} \sin(\pi\delta m_1) \sin(\pi\delta m_2)}{\pi^2 m_1 m_2}. \end{aligned} \quad (33)$$

Velja opozoriti, da  $c_{1,j}(m_1, m_2, 0) \neq \lim_{m_3 \rightarrow 0} c_{1,j}(m_1, m_2, m_3)$ . Pri znanih Fourierovih koeficientih funkcije  $\beta_{i,j}$  vrste (27) aproksimiramo s končnimi vsotami. Za pet značilnih mest zadostuje aproksimacija  $|\underline{m}| = 1000$ .



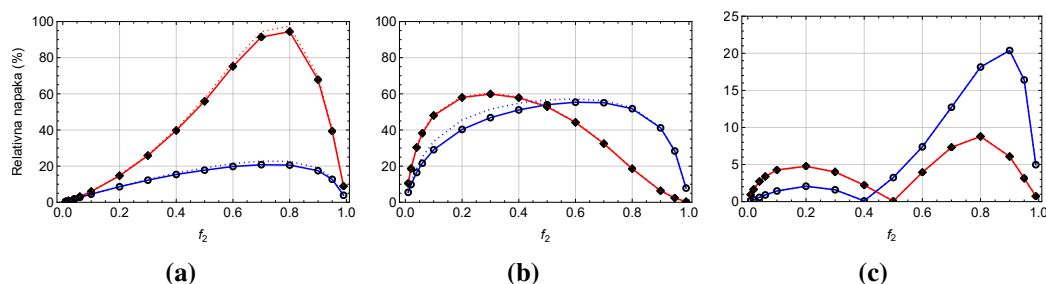
**Slika 1:** Osnovna celica; a) okvir osnovne celice, b) notranjost osnovne celice.

Okvir  $Y_2$  razdelimo na unijo vogalnih kock  $Y_{2,1}$ , zelena barva na sliki 1a in unijo robov brez vogalov  $Y_{2,2}$ , rjava barva na sliki 1a. Fourierove koeficiente  $c_{2,1}$  in  $c_{2,2}$  zaradi omejenega prostora ne navajamo.

Izkaže se, sliki 2a in 2b, da je razlika za med izboljšanimi in klasičnim HS mejami relativno majhna. Znano je, da aproksimacija efektivnih modulov s povprečjem mej ni dobra, saj je pogostokrat ena meja boljša kot druga. Z novimi mejami pa lahko na osnovi razmerja popravkov konstruiramo novo aproksimacijo. Sklepamo, da majhen popravek ocene pomeni, da je ocena boljša kot ocena za katero je popravek velik. Na osnovi tega definiramo aproksimacijo

$$\hat{\mu}_e = \mu_{e,L}^k + \frac{(\Delta\mu_L^k)^p}{(\Delta\mu_L^k)^p + (\Delta\mu_U^k)^p} (\mu_{e,U}^k - \mu_{e,L}^k), \quad (34)$$

kjer je  $k = 1, 2$ ,  $p$  poljubni parameter in  $\Delta\mu_L^k = \mu_L^k - \mu_{e,L,0}^k$  in  $\Delta\mu_U^k = \mu_{U,0}^k - \mu_{e,U}^k$ . Vrednost parametra  $p$  za aproksimacijo na sliki 2c je  $p = 1/2$ . Vidimo, da je aproksimacija zelo dobra z izjemo za  $\mu_e^1$  na območju  $f > 0.7$ , kjer je že  $\mu_{e,L}^1$  primerljivo enako dobra aproksimacija.



**Slika 2:** Primerjava HS mej za  $\mu_e^1$  (rdeča) in  $\mu_e^2$  (modra) z dejanskimi vrednostmi; črtkano klasične HS meje, polna črta izboljšane meje; a) zgornja, b) spodnja meja, c) aproksimacija.

## 5 Zaključek

Za aproksimacijo strižnih modulov moramo poznati funkcije  $\beta_{i,j}$ . Potem, ko jih izračunamo, lahko uporabimo formulo (34) za poljubne materialne parametre. Tako smo dobili napovedano seminumerično formulo za aproksimacijo kubičnih strižnih modulov. Pri uporabi naše metode je pomembna delitev območja  $Y_i$  na podobmočja  $Y_{i,j}$ . S primerno izbrano delitvijo je predlagana aproksimacija dobra tudi za ostala območja.

## Literatura

- [1] A. Bertram. *Elasticity and Plasticity of Large Deformations. An Introduction*. Springer, Berlin, 2005.
- [2] Z. Hashin. The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29:143–150, 1960.
- [3] G. Mejak. Variational formulation of the equivalent eigenstrain method with an application to a problem with radial eigenstrains. *International Journal of Solids and Structures*, 51:1601–1616, 2014.
- [4] G. Mejak. Hashin shtrikman bounds of periodic linear elastic media with cubic symmetry. *Math. Mech. Solids*, 25:1182–1198, 2020.
- [5] G. Mejak. Hashin-shtrikmanove meje kubičnih modulov dvofaznih periodičnih kompozitov z neurejenima materialnima fazama. In J. Slavič and M. Česnik, editors, *Kuhljevi dnevi 2020*, pages 94–101, 2020.
- [6] L. J. Walpole. Elastic behavior of composite materials: theoretical foundations. *Advances in Applied Mechanics*, 21:169–242, 1981.



## *Vpliv temperaturnega gradienta ohlajanja na kristalizacijo HDPE in LDPE polimera*

*Mohor Mihelčič<sup>1</sup>, Urška Gradišar Centa<sup>1</sup> in Lidija Slemenik Perše<sup>1</sup>*

## *The influence of cooling rate on crystallization of HDPE and LDPE polymer*

**Povzetek.** V prispevku smo zasledovali vpliv različnih hitrosti ohlajanja na proces kristalizacije dveh različnih polietilenov, t.j. polietilena visoke (HDPE) in nizke (LDPE) gostote. Za karakterizacijo smo uporabili tri analitske tehnike: diferenčno dinamično kalorimetrijo (DSC), reometrijo in polarizacijsko optično mikroskopijo. Rezultati so pokazali, da ima hitrost ohlajanja vpliv tako na reološke, kot tudi termične in morfološke lastnosti obeh proučevanih polimerov.

**Abstract.** In this paper, we investigated the influence of different cooling rates on the crystallization process of two different polyethylenes, i.e. high density (HDPE) and low density (LDPE) polyethylene. Three analytical techniques were used for characterization: differential scanning calorimetry (DSC), rheometry and polarization optical microscopy. The results showed that the cooling rate affects the rheological, thermal, and morphological properties of both studied polymers.

### **1 Uvod**

Polimerni materiali so v zadnjih nekaj desetletjih postali nepogrešljiv sestavni del našega življenja. Za enega najbolj uporabljenih polimerov na svetu velja polietilen, saj ga prav zaradi njegove nizke teže in obstojnosti uporabljajo na različnih področjih, npr. v medicinske namene, kot embalažo v prehrabeni industriji, tekstilni industriji in gradbeništvu.

Termoplastne delno kristalinične polimere, med katere sodi tudi polietilen, lahko preoblikujemo z različnimi postopki (npr. brizganje, ekstrudiranje, termoformiranje, pihanje). Pri vseh predelovalnih postopkih ima temperatura velik vpliv na strukturne, termične in mehanske lastnosti končnega izdelka, saj temperatura močno vpliva na urejanje polimernih verig in posledično na stopnjo kristaliničnosti. Pri procesiranju moramo polimer najprej staliti, nato ga z eno od tehnik preoblikujemo v željeno obliko, v zadnji stopnji pa je izdelek potrebno še ohladiti. Na notranjo strukturo pomembno vpliva stopnja kristaliničnosti polimerov, od katere so odvisne fizikalne lastnosti končnega izdelka. S povečevanjem stopnje kristaliničnosti

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo, Aškerčeva ulica 6, 1000 Ljubljana, Slovenija

se poveča gostota, togost, udarna in natezno trdnost, odpornost materiala, temperatura taljenja, zniža pa se prepustnost in prevodnost [3, 4].

Na stopnjo kristaliničnosti lahko vplivamo s številnimi parametri, od katerih je eden pomembnejših temperaturni gradient, s katerim oblikovan izdelek ohlajamo. Kristalizacija je termično vzbujen fizikalni proces nastajanja in rasti kristalov, pri katerem se sprošča kristalizacijska toplota. Običajno poteka v dveh stopnjah: prva je nukleacija, slednja pa rast kristalov. Pri študijah kristalizacije je zato potrebno upoštevati tudi hitrost rasti kristalov, ki jo lahko popišemo z različnimi teorijami [7]. Na sam proces kristalizacije vpliva tudi recikliranje [8], dodajanje drugega polimera [5] ali dodatkov oziroma polnil, ki lahko pospešijo ali zavirajo rast nukleacijskih jeder [1, 2].

Pri rasti kristalov, ki zrastejo iz taline, običajno dobimo kompleksnejše kristalne oblike, ki jih imenujemo sferuliti. Njihova formacija je odvisna od več parametrov, kot so število nukleacijskih mest, struktura polimera in temperaturni gradient ohlajanja in drugi. Sferulite sestavljajo področja urejenih, tesno zapakiranih lamel, ki imajo večjo gostoto, trdnost in tudi krhkost v primerjavi z neurejenimi amorfnimi regijami znotraj strukture. Lamelle so med seboj povezane z amorfnimi regijami, ki zagotavljajo elastičnost in udarno žilavost. Po obliki so sferuliti sferično simetrične kristalne strukture, ki rastejo iz osrednjega jedra. Njihova oblika pogosto spominja na malteški križ. V začetni fazi kristalizacije so sferuliti običajno sferične oblike, v poznejših fazah rasti pa sčasoma zadenejo v svoje sosede. Če njihova jedra nastanejo in zrastejo sočasno, so enake velikosti, meje med njimi pa ravne. V primeru, ko rast ni sočasna, pa so končni kristali različnih velikosti, meje med njimi pa so v obliki hiperbol. Velikost in delež kristalov pa močno vplivata na termične lastnosti (npr. temperatura kristalizacije) ter na viskoznost in viskoelastične lastnosti, ki so še posebej pomembne med procesiranjem.

V raziskavi smo se zato osredotočili na določitev vpliva temperaturnega gradienta ohlajanja na termične, reološke in morfološke lastnosti polietilena visoke (HDPE) in nizke (LDPE) gostote. Za izbrana materiala smo s pomočjo DSC meritev določili vpliv različnih temperaturnih gradientov ohlajanja na fazne spremembe in izračunali delež kristaliničnosti. Pri enakih temperaturnih pogojih smo izvedli reološko karakterizacijo, ki je v literaturi redko izvedena z namenom določitve viskoelastičnih lastnosti posamezne faze pred in po kristalizaciji, potek kristalizacije pa smo spremljali tudi s polarizacijskim optičnim mikroskopom. Izbrane analitske tehnike so nam omogočile določiti celoten potek in kinetiko kristalizacijskega procesa. Rezultati so pokazali, da hitrost kristalizacije vpliva na omenjene lastnosti, zaradi različne natančnosti posamezne karakterizacijske tehnike in količine vzorca ki ga uporabimo za analiziramo pa prihaja do rahlega odstopanja pri določanju temperature kristalizacije.

## 1.1 Materiali

V tem delu smo za karakterizacijo uporabili dve različni vrsti polietilena v obliki granul: polietilen visoke gostote HDPE (HDI2061, Braskem Idesa) z gostoto  $\rho_{HDPE} = 0.955 \text{ g/cm}^3$  in polietilen nizke gostote LDPE (780E, Dow Chemicals) z gostoto  $\rho_{LDPE} = 0.923 \text{ g/cm}^3$ . Za karakterizacijo smo izbrali HDPE in LDPE polimera primerljivih molskih mas, t.j.  $M_{w-HDPE} = 5,82 \cdot 10^4 \text{ g/mol}$  in  $M_{w-LDPE} = 5,95 \cdot 10^4 \text{ g/mol}$ .

## 1.2 Karakterizacijske metode

Termične lastnosti LDPE in HDPE polimera smo določili z uporabo diferenčne dinamične kalorimetrije (DSC) na instrumentu TA Q2500 (TA Instruments, ZDA) z avtomatskim

podajalnikom vzorcev. Masa zatehtanih polimernih vzorcev za DSC meritve je bila  $\sim 6 \pm 1$  mg. Pretok dušika kot inertnega plina je bil 50 ml/min. Meritve so bile izvedene v temperaturnem območju med 0 in 200 °C z različnimi temperaturnimi gradienti segrevanja in ohlajanja (1, 5 in 10 °C/min). Vsak posamezen vzorec smo najprej ohladili na 0 °C ter ga pri tej temperaturi zadrževali 5 minut, ga nato z izbranim temperaturnim gradientom segreli na 200 °C z namenom izbrisa termične zgodovine vzorca. Pri tej temperaturi smo vzorec konstantno vzdrževali 5 minut in nato z enakim temperaturnim gradientom ohladili na 0 °C, da smo dobili termogram procesa kristalizacije. Stopnjo kristaliničnosti ( $\chi_c$ ) za HDPE in LDPE polimera smo določili po enačbi 1:

$$\chi_c = \frac{\Delta H_c}{\Delta H_m^0} \cdot 100\%, \quad (1)$$

kjer je  $\Delta H_c$  entalpija kristalizacije in  $\Delta H_m^0$  teoretična entalpija transformacije pri taljenju 100 % kristaliničnega materiala.  $\Delta H_m^0$  za 100 % kristalinični polietilen znaša 293 J/g [6].

Reološko karakterizacijo vzorcev smo izvedli na modularnem reometru Anton Paar MCR 302 (Anton Paar, Avstrija) z uporabo senzorskega sistema plošča-plošča s premerom 25 mm (PP25) pri konstantni medploščni razdalji 0,5 mm in spodnji merilnim sistemom P-PTD200 z grelno kapo H-PTD200. Temperaturno odvisne meritve kristalizacije smo izvedli pri treh različnih temperaturnih gradientih (1, 5 in 10 °C/min) pri konstantni frekvenci ( $\omega = 1$  Hz) oscilacije in strižni napetosti ( $\tau = 2$  kPa), kar je zagotavljalo linearno območje vedenja proučevanih polimerov. Vzorce smo v senzorski sistem vstavili pri 170 °C in jih nato 5 minut termično stabilizirali, da smo odstranili termično zgodovino in zagotovili stabilno temperaturo po celotnem vzorcu.

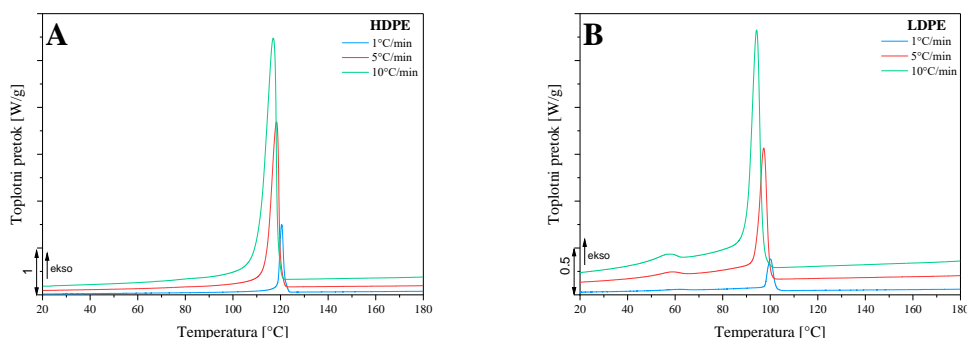
Morfološke lastnosti LDPE in HDPE polimerov pri različnih temperaturnih gradientih smo opazovali s polarizacijskim optičnim mikroskopom Axioskop 2 mat (Carl Zeiss, Nemčija). Temperaturo vzorca smo spreminjali z grelno mizo Linkam LTS 350. Tanko plast polimera, nanešenega na objektno steklo, smo segrevali s hitrostjo 10 °C/min do 200 °C, ter ga pri tej temperaturi zadrževali 5 minut. Nato smo proces kristalizacije spremljali pri treh različnih temperaturnih gradientih ohlajanja t.j. 1, 5 in 10 °C/min. Za določitev velikosti kristalitov smo uporabili ImageJ program, z uporabo metode linearne preseka za določanje velikosti zrn.

V nadaljevanju so vzorci HDPE ali LDPE polimera, ohlajeni z različnim temperaturnim gradientom ohlajanja, označeni sledeče: 1 °C/min – HDPE/LDPE\_1, 5 °C/min – HDPE/LDPE\_5 ter 10 °C/min – HDPE/LDPE\_10.

## 2 Rezultati in diskusija

### 2.1 Termične lastnosti

Rezultati termičnih meritev, pridobljeni z diferenčno dinamično kalorimetrijo (DSC), preko katerih smo določili temperature kristalizacije ( $T_c$ ) za polietilen visoke (HDPE) in nizke (LDPE) gostote, so prikazani na sliki 1.



**Slika 1:** Termogrami DSC meritev za A) HDPE in B) LDPE pri različnih temperaturnih gradientih ohlajanja.

Iz rezultatov je razvidno, da pri faznih prehodih HDPE polimera pride do večjih sprememb entalpije, kot pri LDPE polimeru. Iz slednjega lahko sklepamo na večjo urejenost morfološke strukture pri HDPE. Pri HDPE\_1 vzorcu, ki je bil iz taline ohlajen najpočasneje, do kristalizacije pride pri najvišji temperaturi, t.j. pri 124,88 °C, dočim je bil vrh kristalizacijske krivulje dosežen pri največjem temperaturnem gradientu ohlajanja (HDPE\_10) pa šele pri 122,41 °C. Potek kristalizacije je enak za oba polimera, saj počasno ohlajanje privede do rasti večjih kristalov, ki se začnejo tvoriti prej. Temperatura začetka kristalizacije za LDPE polimer je za ~20 °C nižja kot za HDPE in je pri največjem temperaturnem gradientu ohlajanja znašala 106,75 °C, medtem ko je bila le-ta pri ohlajanju z 1°C/min določena pri 101,64 °C. V primerjavi z LDPE so tudi temperaturni razponi pri ohlajanju ( $\Delta T$ ) za HDPE približno za 3 - 5 °C večji. Rezultati posameznih temperatur prehoda in stopnje kristaliničnosti termičnih meritev pri ohlajanju so predstavljeni v Tabeli 1.

**Tabela 1:** Rezultati DSC meritev HDPE in LDPE polimera pri različnih temperaturnih gradientih ohlajanja: 1, 5 in 10 °C/min.

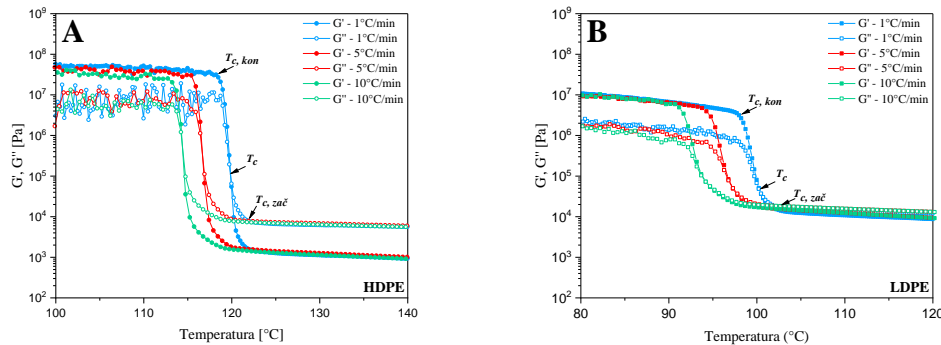
Vzorec	$T_{c, zač}$ [°C]	$T_c$ [°C]	$T_{c, kon}$ [°C]	$\Delta T$ [°C]	$\chi_c$ (%)
HDPE_1	124,88	120,47	111,64	13,24	76,38
HDPE_5	124,01	118,31	106,31	17,70	70,96
HDPE_10	122,41	116,94	102,23	20,18	69,10
LDPE_1	106,75	100,06	95,22	11,53	43,15
LDPE_5	103,84	97,27	90,11	13,73	40,54
LDPE_10	101,64	94,27	85,73	15,91	37,60

Izračunane vrednosti stopnje kristaliničnosti ( $\chi_c$ ) za HDPE polimer kažejo na to, da ima najpočasneje ohlajen (1°C/min) vzorec za 7,28 % višji delež kristaliničnosti t.j. 76,38 %, kot najhitreje ohlajen vzorec (HDPE\_10 -  $\chi_c = 69,10\%$ ). Prav tako velja tudi za LDPE polimer, le da je  $\chi_c$  pri vseh hitrostih ohlajanja za približno 30 % nižja v primerjavi s HDPE polimerom. Slednje je posledica večje razvejanosti molekularne strukture LDPE, ki zmanjšuje nagnjenost

molekul k formiranju tesnih kristalnih struktur. Tako je bila za najpočasneje ohlajan LDPE\_1 določena vrednost stopnje kristalizacije  $\chi_c = 43,15\%$ , kar je za 5,55 % nižje, kot za LDPE\_10.

## 2.2 Reološke lastnosti

Opazovali smo tudi vpliv različnega temperaturnega gradienta ohlajanja za delno kristalinična HDPE in LDPE polimera na viskoelastične lastnosti. Odvisnost modula akumulacije energije (ang. *storage modulus*)  $G'$  in modula energetskih izgub (ang. *loss modulus*)  $G''$  od temperature pri različnih temperaturnih gradientih ohlajanja so predstavljeni na sliki 2. Pri višji temperaturi, ko je polimer v raztaljenem stanju, je  $G''$  večji od  $G'$ , kar ustreza raztaljeni kristalni fazi. Pri nižjih temperaturah pa prihaja do zmanjšanja mobilnosti makromolekul v amorfni območjih, kar zaradi tvorbe kristalitev vodi do zvišanja obeh modulov  $G'$  in  $G''$ . Začetek kristalizacije predstavlja prevoj na krivuljah temperaturnih odvisnosti dinamičnih modulov ( $T_{c, zač}$ , slika 3). Presečišče krivulje, kjer je  $G'$  enak  $G''$ , označuje pri ohlajanju prehod materiala iz tekočega v trdno stanje in je označeno kot srednja temperatura kristalizacije  $T_c$ .



**Slika 2:** Temperaturna odvisnost modula akumulacije energije  $G'$  in modula energetskih izgub  $G''$  za A) HDPE in B) LDPE polimer.

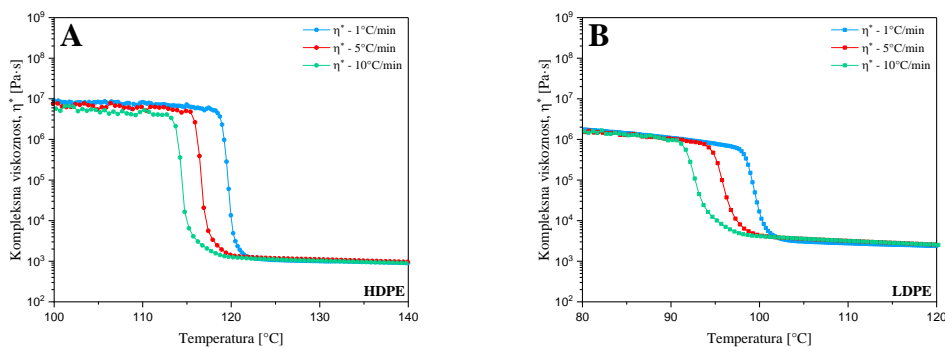
Iz odvisnosti modulov  $G'$  in  $G''$  smo na začetku prevoja  $G'$  določili začetno  $T_{c, zač}$ , srednjo  $T_c$ , ko je  $G'$  enak  $G''$ , ter končno temperaturo  $T_{c, kon}$ , kjer pride do ponovnega prevoja vrednosti  $G'$  (slika 2). Rezultati so predstavljeni v tabeli 2.

**Tabela 2:** Rezultati reološke karakterizacije za HDPE in LDPE polimera pri različnih hitrostih ohlajanja: 1, 5 in 10 °C/min.

Vzorec	$T_{c, zač}$ [°C]	$T_c$ [°C]	$T_{c, kon}$ [°C]	$\Delta T$ [°C]
HDPE_1	122,22	119,94	118,71	3,51
HDPE_5	119,94	116,68	115,40	4,54
HDPE_10	118,71	114,38	112,73	5,98
LDPE_1	101,72	100,39	97,72	4,00
LDPE_5	98,77	97,15	94,27	4,50
LDPE_10	97,17	94,15	90,68	6,49



Slika 3 prikazuje odvisnost kompleksne viskoznosti ( $\eta^*$ ) od temperature pri različnih temperaturnih gradientih ohlajanja. Iz rezultatov lahko vidimo, da je temperatura začetka kristalizacije ( $T_{c, zač}$ ) višja pri vzorcih, ki so bili ohlajani z 1 °C/min, saj le-ta kristalom zagotovi dovolj časa za rast. Opazna pa je tudi razlika v spremembi  $\eta^*$  med tekočim in trdnim stanjem HDPE in LDPE. Pri HDPE se je viskoznost iz tekočega v trdno stanje povečala za štiri dekade, medtem ko pri LDPE le dve dekadi. Temperaturna razlika ( $\Delta T$ ) med začetkom ( $T_{c, zač}$ ) in koncem ( $T_{c, kon}$ ) kristalizacije se s temperaturnim gradientom ohlajanja povečuje in je tako za HDPE\_1 le-ta 3,51 °C, za HDPE\_10 pa 5,98 °C. Temperaturna razlika za LDPE je pri vseh hitrostih ohlajanja približno za 0,5 °C višja napram HDPE. Rezultati kažejo tudi na to, da je kompleksna viskoznost v talini neodvisna od hitrosti ohlajanja, kar pomeni, da so v talini raztaljeni vsi kristali, ne glede na njihovo število in velikost. V primeru LDPE je kompleksna viskoznost tudi v trdnem stanju po končani kristalizaciji neodvisna od hitrosti ohlajanja, medtem ko očitno velikost in število nastalih kristalov nekoliko vplivata na konsistenco kristaliziranega HDPE, saj se viskoznost trdnega HDPE z naraščajočo hitrostjo ohlajanja zmanjšuje.

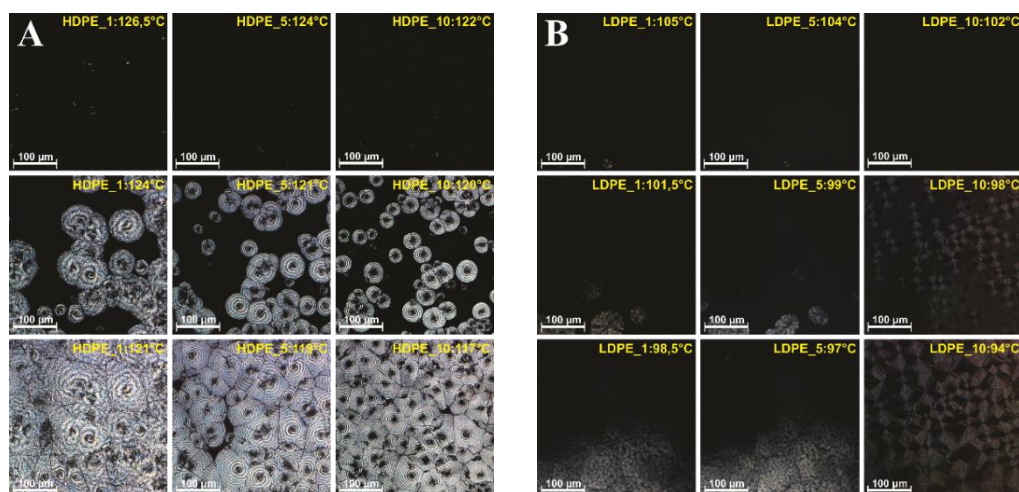


**Slika 3:** Temperaturna odvisnost kompleksne viskoznosti za A) HDPE in B) LDPE polimer.

### 2.3 Optične lastnosti

Slika 4 prikazuje proces kristalizacije za HDPE in LDPE polimera pri različnih temperaturnih gradientih ohlajanja, opazovanim s polarizacijskim optičnim mikroskopom. Začetne slike v posamezni vrsti prikazujejo nastanek kristalizacijskih jeder ter temperaturo, pri kateri so le-ti začeli rasti ( $T_{c, zač}$ ). Srednja vrsta predstavlja srednjo temperaturo, pri kateri se konča nemotena rast ( $T_c$ ), v spodnji vrstici pa je predstavljena končna velikost sferulitov ob zaključeni kristalizaciji ( $T_{c, kon}$ ).

Bistvena razlika, ki smo jo opazili med različnimi temperaturnimi gradienti ohlajanja, sta nastanek različne velikosti kristalov, ter temperatura kristalizacije. Iz poteka rasti sferulitov pri ohlajanju lahko opazimo tudi, kako na njihovo rast in obliko vplivajo sosednji kristali. Iz posnetkov na sliki 4 se vidi, da rastoča jedra v sredini nemoteno rastejo, dokler se ne zaletijo v sosednje kristale. Ko se zaletijo drug v drugega, se nadalje širijo v proste smeri. Zaradi tega lahko večji kristali zrastejo na robovih taline, saj imajo tam največ prostora za svojo rast.



**Slika 4:** Optični posnetki rasti kristalov polimera iz taline z različnim temperaturnim gradientom ohlajanja (1, 5 in 10 °C/min) A) HDPE in B) LDPE

Iz dobljenih mikrografov smo določili povprečne velikosti sferulitov, ki so poleg določenih temperatur kristalizacije predstavljene v tabeli 3. Rezultati jasno kažejo na odvisnost velikosti kristalov od hitrosti ohlajanja, saj se z naraščajočo hitrostjo ohlajanja tako pri LDPE, kot tudi pri HDPE velikost kristalov zmanjšuje.

**Tabela 3:** Rezultati optičnih meritev HDPE in LDPE polimera pri različnih hitrostih ohlajanja (1, 5 in 10 °C/min).

Vzorec	$T_{c, zač}$ [°C]	$T_c$ [°C]	$T_{c, kon}$ [°C]	$\Delta T$ [°C]	Povprečna velikost kristalitov ( $\mu\text{m}$ )
HDPE_1	126,50	124,00	121,00	5,50	$49,48 \pm 2,66$
HDPE_5	124,00	121,00	119,00	5,00	$35,50 \pm 0,71$
HDPE_10	122,00	120,00	117,00	5,00	$32,64 \pm 1,36$
LDPE_1	105,00	101,50	98,50	5,50	$97,07 \pm 10,40$
LDPE_5	104,00	99,00	97,00	7,00	$71,82 \pm 4,52$
LDPE_10	102,00	98,00	94,00	8,00	$44,45 \pm 11,71$

### 3 Zaključek

Razumevanje poteka kristalizacije polimerov je zelo pomembno, saj ima temperaturni gradient ohlajanja velik vpliv na končne lastnosti izdelka. V tem delu smo predstavili proces kristalizacije pri treh različnih temperaturnih gradientih ohlajanja (1, 5 in 10 °C/min) za dva polietilena različnih gostot (HDPE in LDPE), ki smo ga zasledovali s tremi različnimi tehnikami.

Rezultati termične analize kažejo, da pri hitrejšem temperaturnem gradientu ohlajanja do kristalizacije obeh polimerov pride pri nižjih temperaturah. Ugotovili smo, da je pri višjih temperaturnih gradientih ohlajanja razpon temperatur, v katerem se kristalizacija začne in konča, večji, kot pri nižjih. Deleži kristaliničnosti, določeni s pomočjo DSC tehnike, kažejo, da imajo najpočasneje ohlajeni vzorci najvišjo stopnjo kristaliničnosti. Pri LDPE polimeru je

bila zaradi bolj razvejane strukture v primerjavi s HDPE dosežena nižja stopnja kristaliničnosti.

Rezultati reološke analize prav tako pokažejo, da pri višjih temperaturnih gradientih ohlajanja do kristalizacije pride pri nižjih temperaturah, poveča se tudi temperaturna razlika ( $\Delta T$ ) med začetkom in koncem kristalizacije. Hitrost ohlajanja vpliva tudi na vrednost kompleksne viskoznosti ( $\eta^*$ ). Pri temperaturah, ko je HDPE v trdnem stanju, je  $\eta^*$  skoraj za celo dekada višja, napram LDPE polimeru, medtem ko so vrednosti  $\eta^*$  v talini približno enake.

Polarizacijska optična mikroskopija omogoča vizualno spremljanje rasti kristalov, kar dopolnjuje termično in reološko karakterizacijo. Povprečna velikost nastalih sferulitov je neposredno povezana s temperaturnim gradientom ohlajanja in je bila za vzorec z najnižjo hitrostjo ohlajanja napram najhitreje ohlajenemu vzorcu približno za polovico manjša. To velja tako za HDPE, kot tudi za LDPE.

Iz rezultatov lahko povzamemo, da počasnejši kot je temperaturni gradient ohlajanja polimera, večji kristali zrastejo, kar pa posledično pomeni, izboljšanje mehanskih lastnosti polimera.

## Zahvala

To delo je finančno podprla Javna agencija za raziskovalno dejavnost (ARRS) v okviru programa št. P2-0264.

## Literatura

- [1] A. Oseli, A. Vesel, E. Žagar, and L. Slemenik Perše, *Mechanisms of Single-Walled Carbon Nanotube Network Formation and Its Configuration in Polymer-Based Nanocomposites*, *Macromolecules*, 54, 3334–3346, 2021.
- [2] A. Oseli, A. Vesel, M. Mozetič, E. Žagar, M. Huskić, and L. Slemenik Perše, *Nano-mesh superstructure in single-walled carbon nanotube/polyethylene nanocomposites, and its impact on rheological, thermal and mechanical properties*, *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, 136, 105972, 2020.
- [3] C. Leyva-Porras et al., *Injection Molding of Low-Density Polyethylene (LDPE) as a Model Polymer: Effect of Molding Parameters on the Microstructure and Crystallinity*, *Polymers*, 13, 3597, 2021.
- [4] D. Li, L. Zhou, X. Wang, L. He, and X. Yang, *Effect of Crystallinity of Polyethylene with Different Densities on Breakdown Strength and Conductance Property*, *Materials*, 12, 1746, 2019.
- [5] J. W. Teh, H. P. Blom, and A. Rudin, *A study on the crystallization behaviour of polypropylene, polyethylene and their blends by dynamic mechanical and thermal methods*, *Polymer*, 35, 1680–1687, 1994.
- [6] L. Zhou, X. Wang, Y. Zhang, P. Zhang, and Z. Li, *An Experimental Study of the Crystallinity of Different Density Polyethylenes on the Breakdown Characteristics and the Conductance Mechanism Transformation under High Electric Field*, *Materials*, 12, 2657, 2019.
- [7] M. C. Zhang, B.-H. Guo, and J. Xu, *A Review on Polymer Crystallization Theories*, *Crystals*, 7, 1–37, 2017.
- [8] P. Oblak, J. Gonzalez-Gutierrez, B. Zupančič, A. Aulova, and I. Emri, *Processability and mechanical properties of extensively recycled high density polyethylene*, *Polym. Degrad. Stab.* 114, 133–145, 2015.



## *Vpliv temperature ulivanja na makroizcejanje pri kontinuirnem ulivanju jekla*

*Katarina Mramor<sup>1</sup>, Robert Vertnik<sup>2</sup> in Božidar Šarler<sup>1,3</sup>*

### *The influence of casting temperature on macrosegregation in continuous casting of steel*

**Povzetek.** V prispevku raziščemo vpliv temperature ulivanja na makroizcejanje pri kontinuirnem ulivanju jekla. Obravnavan tehnološki problem določajo sklopljene enačbe za maso, gibalno količino, energijo in sestavine, ki jih rešimo z brez mrežno lokalno kolokacijsko metodo z radialnimi baznimi funkcijami v dveh dimenzijah. Turbulenco modeliramo z modelom velikih vrtincev, kašasto področje s poroznim sredstvom, tlačno-hitrostno sklopitev pa implementiramo z metodo delnih korakov. Predstavljamo analizo vpliva temperature ulivanja na temperaturno, hitrostno in koncentracijsko polje ogljika. Ugotovili smo, da znižanje temperature ulivanja znižuje makroizcejanje.

**Abstract.** This contribution presents the influence of casting temperature on macrosegregation in the continuous casting of steel. The considered technological problem is defined by coupled equations for mass, momentum, energy, and species that are solved by the local radial basis collocation method. Turbulence is modeled with a large eddy simulation model, mushy zone with porous media, and pressure-velocity coupling with fractional step method. We present the analysis of casting temperature on temperature, velocity, and carbon concentration field. We discovered, that lowering the casting temperature lowers the macrosegregation.

## **1 Uvod**

Kontinuirno ulivanje jekla je eden izmed najpogosteje uporabljenih postopkov za izdelavo jeklenih polizdelkov. Pri procesu ulivanja kapljevito jeklo skozi izlivek ulijemo v kokilo, kjer se zaradi velikih hitrosti pojavi turbulentno gibanje, ki znatno vpliva na temperaturno in sestavinsko polje in posledično na končno makroizcejanje. Za boljše razumevanje razmer znotraj kokile, kjer meritve zaradi visokih temperature in težke dostopnosti niso mogoče, uporabljamo numerične simulacije. Turbulentno gibanje opišemo z modelom velikih vrtincev (LES), pri čemer uporabimo Smagorinsky-Lilly model za turbulentno viskoznost.

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

<sup>2</sup> Štore Steel d.o.o.

<sup>3</sup> Inštitut za kovinske materiale in tehnologije, Laboratorij za simulacijo materialov in procesov

Numerične metode, ki se uporabljajo za simulacijo tega procesa, segajo od klasičnih metod, kot je npr. metoda končnih volumov [3, 8-9] do modernejših metod, kot so npr. brez mrežne metode [11]. Za izračun omenjenega primera smo izbrali brez mrežno lokalno kolokacijsko metodo z radialnimi baznimi funkcijami [10]. Metoda je enostavna za numerično implementacijo, saj ne potrebuje generacije mreže, rešitev v dveh dimenzijah je preprosto dograditi v rešitev v treh dimenzijah, rezultati pa so primerljivi z rezultati klasičnih numeričnih metod [6]. V tem prispevku z brez mrežno metodo obravnavamo vpliv temperature ulivanja na makroizcejanje ogljika v visoko-ogljicnem jeklu med kontinuirnim ulivanjem. Problem je tehnološko pomemben, saj intenziteta makroizcejanja vpliva na vse postopke nadaljnega termo-mehanskega procesiranja (vroče valjanje, ohlajanje, žarjenje, itd.).

## 2 Numerični model

Fizikalni model opisuje strjevanje jekla v poenostavljenem 2D modelu kontinuirnega ulivanja. Vodilne enačbe so formulirane v modelu kontinuumske mešanice in so zapisane v kartezičnem koordinatnem sistemu za nestisljivo Newtonsko tekočino. Predpostavimo, da sta gostoti kapljevitega in trdnega jekla konstantni in enaki  $\rho_L = \rho_S = \rho$ . Enačba za ohranitev mase je zato podana kot

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0; \quad \mathbf{u} = f_S \mathbf{u}_S + f_L \mathbf{u}_L, \quad (1)$$

kjer je hitrost mešanice  $\mathbf{u}$  linearna kombinacija faznih hitrosti  $\mathbf{u}_\ell$  in volumskih deležev  $f_\ell$ , pri čemer z  $\ell$  označimo kapljevito  $\ell = L$  oziroma trdno  $\ell = S$  fazo. Makroskopska ohranitvena enačba za gibalno količino je podana z

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [(\mu_L + \mu_t)(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] - \mathbf{F}_D + \mathbf{F}_B, \quad (2)$$

kjer  $t$  predstavlja čas,  $p$  tlak,  $\mu_L$  dinamično viskoznost,  $\mu_t$  turbulentno viskoznost,  $\mathbf{F}_D = \mu_L [K_0(1 - f_L)^2 / f_L^3](\mathbf{u} - \mathbf{u}_S)$  je Darcy-jev člen, ki opisuje tok skozi porozen medij s permeabilnostjo  $K_0$  in  $\mathbf{F}_B = \rho \mathbf{g} [\beta_T(T - T_{ref}) + \beta_C(C_L - C_{ref})]$  Bousinesque-ov približek, ki ga uporabljamo za opis vzgona kapljevitega jekla v gravitacijskem polju s pospeškom  $\mathbf{g}$ . Pri tem predstavljata  $\beta_T$  in  $\beta_C$  koeficienta temperaturnega in sestavinskega raztezka,  $T$  in  $C$  temperaturo in koncentracijo,  $T_{ref}$  in  $C_{ref}$  referenčni temperaturi in koncentraciji zlitine. Makroskopska ohranitvena enačba za energijo je podana z

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot [\rho f_S (h_L - h_S)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_S)] + \nabla \cdot (f_L \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla h_L), \quad (3)$$

kjer je  $h$  masno specifična entalpija mešanice, ki je podana kot linearna kombinacija masno specifičnih faznih entalpij  $h_\ell$  in volumskih deležev,  $\lambda$  označuje toplotno prevodnost in  $Pr_t$  turbulentno Prandtl-ovo število. Ohranitvena enačba za masni delež sestavine  $C$  je podana z

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C \mathbf{u}) = \nabla \cdot (D \nabla C) + \nabla \cdot [\rho (C_L - C)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_S)] + \nabla \cdot (f_L \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla C_L) \quad (4)$$

kjer je  $D$  difuzijska konstanta mešanice in  $Sc_t$  turbulentno Schmidtovo število. Masni delež sestavine v talini, temperatura in volumski delež kapljevine so sklopljeni z vzvodnim pravilom

preko enačb  $f_L = 1 - (T - T_L) / [(1 - k_p)(T - T_m)]$ ,  $C_L = C / [1 + (1 - f_L)(k_p - 1)]$  in  $T_L = T_m + (T_e - T_m)C / C_e$ , kjer  $k_p = C_s / C_L$  predstavlja delilni koeficient,  $T_m$  temperaturo tališča čiste sestavine,  $T_e$  temperaturo evtektika in  $C_e$  koncentracijo evtektika. Vrednosti določimo iz faznega diagrama za železo in ogljik.

Turbulenco modeliramo z modelom velikih vrtincev, pri čemer uporabimo Smagorinsky-Lilly model za modeliranje turbulentne viskoznosti  $\mu_t = \rho L_S^2 \sqrt{2\mathbf{S}:\mathbf{S}}$ ,  $\mathbf{S} = 1/2(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)$  in  $L_S = \min(\kappa_{vK}d, f_\mu C_S \Delta)$ , kjer je  $\kappa_{vK} = 0.4$  von Karmanova konstanta,  $d$  razdalja do najbližje stene,  $f_\mu = 1 - \exp(y^+ / A^+)$  van Driestova dušilna funkcija,  $C_S = 0.168$  Smagorinsky-jeva konstanta in  $\Delta$  pasovna širina filtra.  $y^+$  predstavlja brezdimenzijsko razdaljo do stene in  $A^+ = 26$  [5].

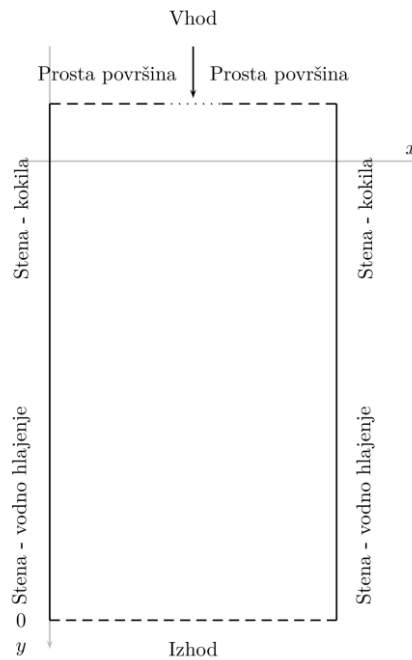
## 2.1 Robni pogoji

V obravnavanem primeru določimo robne pogoje na vhodu  $T = T_{cast}$ ,  $\mathbf{u} = (0 \text{ m/s}, u_{cast} a_b / d_2)$ ,  $C = C_{ref}$  in  $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ m/s}$ , kjer je hitrost ulivanja  $u_{cast} = 0.027 \text{ m/s}$  reskalirana s širino izlivka  $a_b = 0.035 \text{ m}$  in širino kokile  $d_2 = 0.18 \text{ m}$ . Hitrost ulivanja dodatno prilagodimo še z vpeljavo izotropnih fluktuacij, kot je prikazano v [1, 7].  $T_{cast}$  je temperatura ulivanja. Robni pogoji na prosti površini na vrhu kokile so  $u_y = 0 \text{ s}^{-1}$ ,  $\partial T / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ K/m}$ ,  $\partial C / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ m}^{-1}$  in  $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ Pa/m}$ , na premičnih stenah  $u_y = u_{cast}$ ,  $q_{cz} = h_{cz}(T - T_{cw})$ ,  $\partial C / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ 1/m}$  in  $\partial p / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ Pa/m}$ . Koeficient prestopa toplote je v kokili  $h_{cz} = 2000 \text{ W/(m}^2\text{K)}$  in v s prhami hlajenem delu pod kokilo  $800 \text{ W/(m}^2\text{K)}$  in ga uporabimo za izračun toplotnega toka  $q_{cz}$ . Temperatura hladilne vode  $T_{cw}$  je  $20^\circ \text{ C}$ . Robni pogoji na izhodu so  $\partial \mathbf{u} / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ s}^{-1}$ ,  $\partial T / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ K/m}$ ,  $\partial C / \partial \mathbf{n} = 0 \text{ m}^{-1}$  in  $p = 0 \text{ Pa}$ .

## 3 Numerična metoda in postopek reševanja

### 3.1 Lokalna kolokacijska metoda z radialnimi baznimi funkcijami

Brezmrežna metoda, ki jo uporabljamo za reševanje zgoraj omenjenega sistema enačb uporablja radialne bazne funkcije na pet-točkovnih lokalnih pod-domenah. Za izračun približka uporabimo kolokacijo ter eksplisitno Eulerjevo metodo za napredovanje po času. Uporabljamo multikvadrčne radialne bazne funkcije  $\psi_i(\mathbf{x}) = \sqrt{r_i^2 + c^2}$  z oblikovnim parametrom, ki ga postavimo na  $c = 32$ . Za tlačno-hitrostno sklopitev uporabimo metodo delnih korakov. Porozen medij je modeliran z Darcy-jevo relacijo in Kozeny-Carmanovo konstanto za porozen medij. V brez mrežnem kontekstu širino filtra, ki se uporablja v metodi velikih vrtincev modeliramo v 2D kot  $\Delta = V^{1/2} = (\max(x_i - x_j) \max(|y_i - y_j|) / 4)^{1/2}$  (glej [5]).



Slika 1: Shema geometrije in robnih pogojev računskega območja.

## 4 Numerični primer

### 4.1 Geometrija

Uporabili smo poenostavljeno 2D geometrijo naprave za kontinuirano ulivanje jekla. Računsko območje sestavlja podolgovata povsem navpično postavljena kokila. Območje je visoko 1.5 m in široko 0.18 m. Predpostavimo, da je izlivek postavljen sredinsko na vrh območja in je širok 0.035 m. Višina kokile je 0.8 m.

### 4.2 Snovne lastnosti

Za izračun uporabljamo poenostavljene snovne lastnosti jekla ( $\rho = 7300 \text{ kg/m}^3$ ,  $\lambda = 33 \text{ W/(mK)}$ ), likvidus temperatura  $T_L = 1482 \text{ }^\circ\text{C}$ , talilna entalpija  $h_m = 173404 \text{ J/kg}$ ,  $K_0 = 1.6 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2$ , solidus temperatura  $T_S = 1400 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $c_{pL} = 804 \text{ J/(kg K)}$ ,  $c_{pS} = 698 \text{ J/(kg K)}$ ,  $\mu_L = 0.006 \text{ Pa s}$ ,  $D_L = 1.0 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $D_S = 1.6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $\beta_T = 10^{-4} / \text{K}$ ,  $\beta_C = 4 \cdot 10^{-3} / \text{wt\%}$ , koncentracija ogljika  $C_0 = 0.51 \text{ wt\%}$ ,  $Pr_t = 0.9$  in  $Sc_t = 1.0$ ), ki so povzete po [11,12].

### 4.3 Numerična implementacija

Rešitev z lokalno kolokacijsko metodo z radialnimi baznimi funkcijami je bila izračunana na osmih 2.00 GHz Intel Xenon 2650 procesorjih na 64-bitnem operacijskem sistemu Windows 10. Program je napisan v modernem Fortranu.

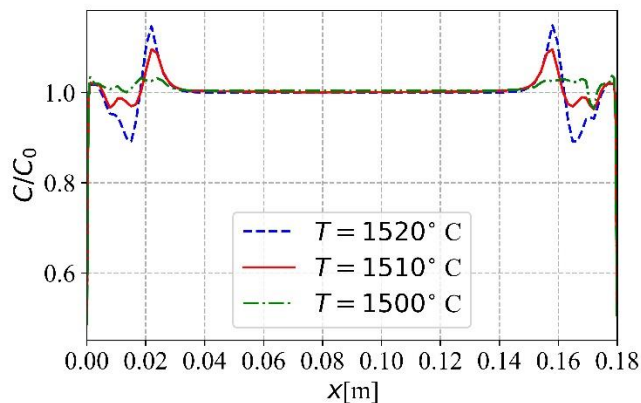
## 5 Rezultati

Rezultati so bili izračunani za časovni korak  $\Delta t = 10^{-3}$  s in 37696 točk. Časovno povprečje je bilo narejeno na časovnem intervalu 300 s. Točke so zgoščene proti stenam, na zgornjem robu, pri izlivku, ter na koncu kokile (glej [4]). Verifikacija numeričnega modela je bila opravljena v [4], validacija turbulentnega modela pa v [2], kjer so bili rezultati numeričnih modelov primerjani z rezultati eksperimenta vodnega modela.

Zanima nas vpliv temperature ulivanja na celotno temperaturno, hitrostno in koncentracijsko polje ogljika. Primerjali smo polja in prečne preseke za različne vrednosti temperature ulivanja  $T_{cast} = 1500$  °C,  $T_{cast} = 1510$  °C,  $T_{cast} = 1520$  °C. Rezultati so prikazani za časovno povprečene vrednosti omenjenih spremenljivk.

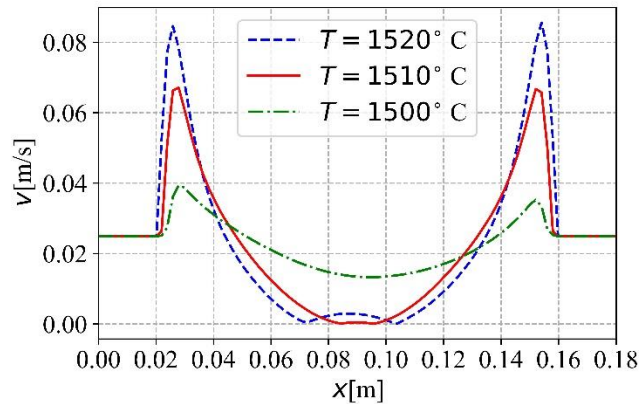
Slika 2 prikazuje prečne preseke normiranega časovno povprečnega koncentracijskega polja ogljika na višini 0.5 m v odvisnosti od temperature ulivanja. Na višini 0.5 m popolnoma strjen del sega do okvirno 0.02 m in nad 0.16 m. Pri višjih temperaturah ulivanja v popolnoma strjenem delu opazimo nižjo vrednost ogljika glede na nominalno vrednost. Pri nižjih temperaturah ulivanja je minimum ogljika v strjenem delu manjši, koncentracijsko polje je bolj homogeno. V kašastem območju ob robu pri višjih temperaturah ulivanja opazimo presežek ogljika. Le-ta je manjši za nižje temperature ulivanja, posledično je koncentracijsko polje za nižje temperature ulivanja bolj homogeno.

Slika 3 prikazuje prečni presek časovnega povprečja magnitude hitrosti na višini 0.5 m pri različnih temperaturah ulivanja. Hitrosti popolnoma strjenega dela so enake, saj jih določimo s hitrostjo ulivanja, ki je za vse opazovane primere enaka. Razlika je vidna v kašastem in popolnoma tekočem delu, kjer pri višjih temperaturah ulivanja dobimo višje hitrosti v kašastem delu ter nižje v sredini kokile. Pri nižjih temperaturah ulivanja dobimo nižje hitrosti v kašastem delu in nekoliko višje v popolnoma tekočem delu. Zaradi višjih hitrosti se pojavijo večje razlike v koncentraciji, kot je razvidno na sliki 2.



**Slika 2:** Prečni presek normiranega koncentracijskega polja v odvisnosti od temperature ulivanja na višini 0.5 m.





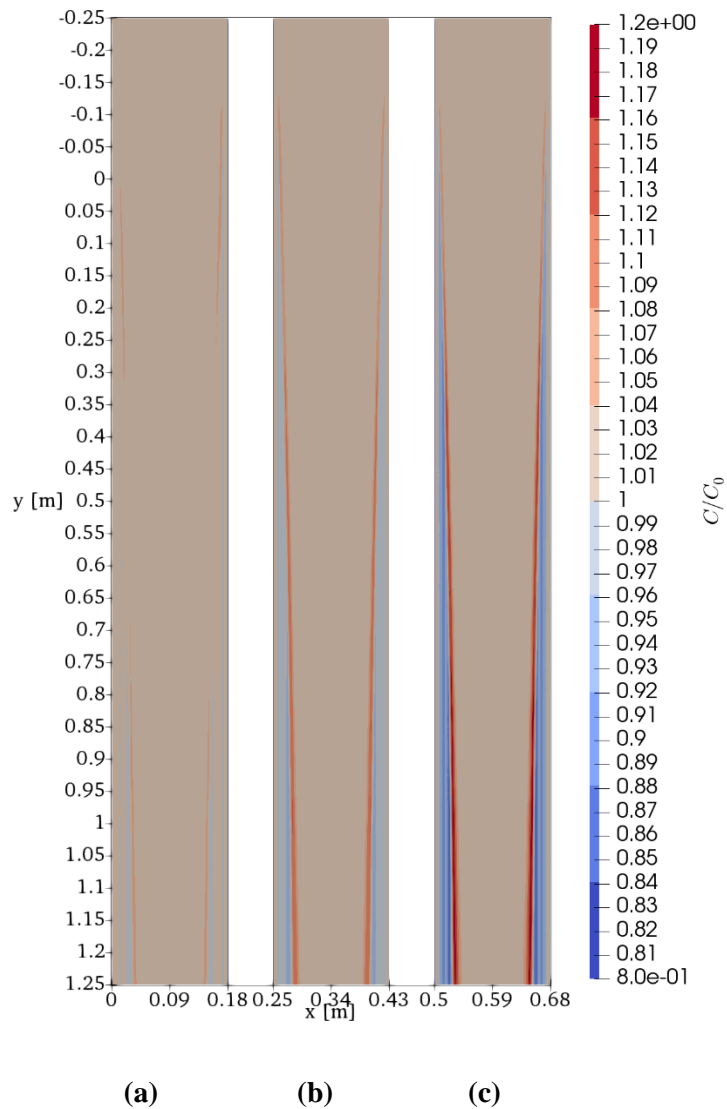
**Slika 3:** Prečni presek magnitude hitrosti v odvisnosti od temperature ulivanja na višini 0,5 m.

Slika 4 prikazuje primerjavo časovno povprečnih normiranih koncentracijskih polj ogljika za različne temperature ulivanja. Pri višjih temperaturah ulivanja dobimo večja nihanja oziroma manj homogeno koncentracijsko polje v popolnoma strjenem delu. Pri nižjih temperaturah ulivanja je koncentracijsko polje ogljika bolj homogeno. V popolnoma strjenem delu pa so koncentracije višje. Nižje temperature so torej bolj ugodne za nastanek bolj homogenega koncentracijskega polja, žal pa so s tehnološkega vidika težko dosegljive.

## 6 Zaključek

V prispevku smo raziskali vpliv temperature ulivanja glede na sestavinsko polje ogljika, hitrostno polje in temperaturno polje. Višje temperature ulivanja povzročijo bolj turbulentno obnašanje tekočine in posledično višje razlike v hitrosti med kašastim in popolnoma kapljevitim delom tekočine, kar se nato odraža v sestavinskem polju. Pri višjih temperaturah ulivanja dobimo manj homogeno koncentracijsko polje, kar je nezaželeno s tehnološkega vidika. V izračunih smo poleg najvišje temperature, ki se za podane parametre uporablja v proizvodnji, preučili še dve nižji temperaturi ulivanja. Kljub temu, da je rezultat le-teh bolj homogeno koncentracijsko polje, njuna implementacija zaradi tehnoloških omejitev (morebitno strjevanje v izlivku in mašenje izlivka) ni vedno mogoča.

**Zahvala:** Avtorji se zahvaljujejo podpori Javne agencije za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije (ARRS) v okviru projekta L2-9246 Večnivojsko in večfizikalno modeliranje konkurenčnega kontinuiranega ulivanja ter podjetju Štore Steel ([www.store-steel.si](http://www.store-steel.si)).



**Slika 4:** Koncentracijsko polje ogljika za različne temperature ulivanja; a)  $T = 1500\text{ °C}$ , b)  $T = 1510\text{ °C}$ , c)  $T = 1520\text{ °C}$ .

### Literatura

- [1] L. Davidson, *Hybrid LES-RANS: Inlet boundary conditions for flows with recirculation*, Notes Numer. Fluid Mech. Multidiscip. Des. 97, 55--66, 2008.
- [2] J. Gregorc, A. Kunavar, B. Šarler, *RANS versus Scale Resolved Approach for Modeling Turbulent Flow in Continuous Casting of Steel*, Metals. 11, 1140, 2021.

- [3] Z. Liu, B. Li, *Large-Eddy Simulation of Transient Horizontal Gas–Liquid Flow in Continuous Casting Using Dynamic Subgrid-Scale Model*, Metall. Mater. Trans. B Process Metall. Mater. Process. Sci. 48, 1833--1849, 2017.
- [4] K. Mramor, R. Vertnik, B. Šarler, *Large-eddy simulation of continuous casting process*, in: M. Wu (Ed.), STEEL SIM 2021, 9th Int. Conf. Model. Simul. Metall. Process. Steelmak., ASMET, 310--317, 2021.
- [5] K. Mramor, R. Vertnik, B. Šarler, *Meshless approach to the large-eddy simulation of the continuous casting process*, Eng. Anal. Bound. Elem. 138, 319--338, 2022.
- [6] K. Mramor, R. Vertnik, B. Šarler, *Simulation of natural convection influenced by magnetic field with explicit local radial basis function collocation method*, C. - Comput. Model. Eng. Sci. 92, 327--352, 2013.
- [7] T. Saad, D. Cline, R. Stoll, J.C. Sutherland, *Scalable tools for generating synthetic isotropic turbulence with arbitrary spectra*, AIAA J. 55, 327--331, 2017.
- [8] S. Sivaramakrishnan, B.G. Thomas, S.P. Vanka, *Large Eddy Simulation of Turbulent Flow in Continuous Casting of Steel*, Mater. Process. Comput. Age III. 189--198, 2000.
- [9] B. Šarler, R. Vertnik, K. Mramor, *A numerical benchmark test for continuous casting of steel*, IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. 33, 2012.
- [10] B. Šarler, R. Vertnik, *Meshfree explicit local radial basis function collocation method for diffusion problems*, Comput. Math. with Appl. 51, 1269--1282, 2006.
- [11] R. Vertnik, B. Šarler, *Simulation of continuous casting of steel by a meshless technique*, Int. J. Cast Met. Res. 22, 311--313, 2013.
- [12] R. Vertnik, K. Mramor, B. Šarler, *Solution of three-dimensional temperature and turbulent velocity field in continuously cast steel billets with electromagnetic stirring by a meshless method*, Eng. Anal. Bound. Elem. 104, 347--363, 2019.



## *Napovedovanje dobe trajanja tankostenskih avksetičnih satovij*

*Branko Nečemer<sup>1</sup> in Srečko Glodež<sup>1</sup>*

### *Fatigue life prediction of thin-walled auxetic honeycombs*

**Povzetek.** Ta študija predstavlja numerične analize določanja dobe trajanja petih različnih avksetičnih satovij, izdelanih iz aluminijeve zlitine AA 5083-H111: (i) kiralna struktura, (ii) struktura v obliki zvezde, (iii) struktura v obliki črke S, (iv) struktura z dvojno puščico in (v) vbočena šestkotna struktura. Raziskava temelji na predhodnem raziskovalnem delu avtorjev, kjer je bil razvit in potrjen uporabljen numerični model. Za izračun dobe trajanja je bila uporabljena deformacijska metoda, ki temelji na Coffin-Mansonovem modelu z upoštevanjem Morrow korekcije srednje napetosti v okviru programske opreme ANSYS. Numerične analize so bile izvedene v kontroli deformacije pri različnih vrednostih amplitudnih deformacij. Zaradi različne togosti analiziranih struktur so numerični rezultati predstavljeni z vzdržljivostnimi krivuljami v treh različnih oblikah.

**Abstract.** This study presents the computational analysis for determining the fatigue resistance of five different auxetic honeycombs made of aluminium alloy AA 5083-H111: (i) A Chiral auxetic structure, (ii) A Star-shaped auxetic structure, (iii) A S-shaped auxetic structure, (iv) A Double arrowhead auxetic structure and (v) A Re-entrant auxetic structure. The research is based on the authors previous work, where the computational model for the fatigue analyses of the auxetic structures was built and validated. For the fatigue life calculation, the strain life approach was applied, with consideration of a Morrow mean stress correction in the framework of the ANSYS software. The computational analysis was performed in a displacement control regime at different amplitude strain levels. Due to the different stiffness of the analysed structures, the numerical results are presented with endurance curves in three different forms.

## **1 Uvod**

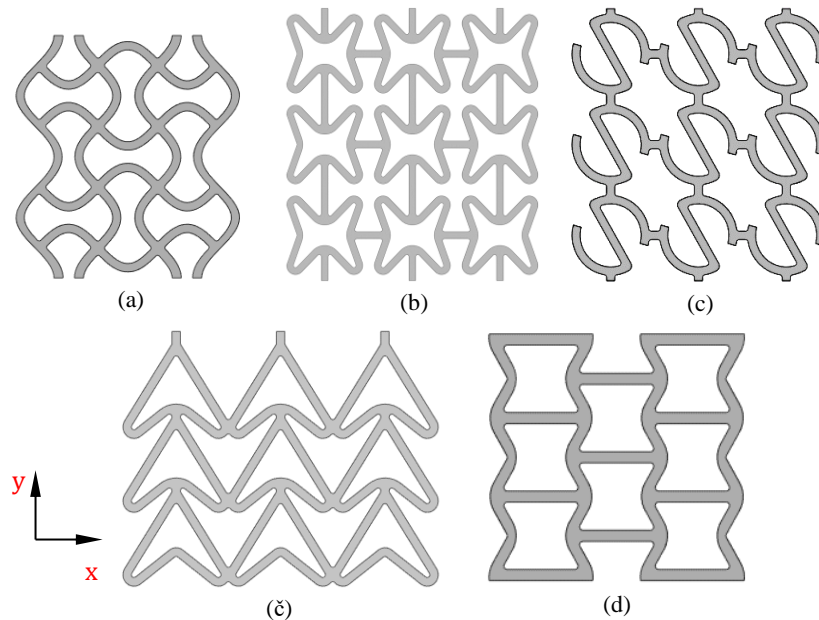
Avksetične celične strukture spadajo v družino sodobnih naprednih materialov, ki kažejo negativno Poissonovo razmerje. Pri delovanju zunanje obremenitve je negativno Poissonovo razmerje posledica vrtenja osnovnih celic znotraj geometrije avksetične strukture [6]. Napredne geometrijske možnosti avksetičnih celičnih materialov ponujajo številne možnosti za njihovo široko uporabo pri gradnji lahkih konstrukcij. Omenjeni materiali imajo zaradi edinstvenih mehanskih lastnosti možnost uporabe v različnih potencialnih aplikacijah v letalskem inženirstvu, avtomobilski industriji, gradbeništvu, itd. [4], [2]. V zadnjih desetletjih

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

so bile izvedene številne raziskave na področju utrujenosti in lomnega obnašanja celičnih struktur. V preglednem članku, ki ga je objavil Nečemer s sodelavci [9], so različne celične strukture analizirane glede na njihov mehanski odziv pri statični in dinamični obremenitvi, pri čemer se je do sedaj le nekaj raziskovalcev osredotočilo na utrujanje in lomno obnašanje avksetičnih celičnih struktur. Choi s sodelavci [1] je eksperimentalno analiziral lomno žilavost bakrenih pen s pozitivnim in negativnim Poissonovim razmerjem. Primerjava eksperimentalnih rezultatov je pokazala, da ima bakrena avksetična pena bistveno večjo lomno žilavost v primerjavi z bakreno peno s pozitivnim Poissonovim razmerjem. Nečemer s sodelavci [10] je raziskoval geometrijski učinek enotne celice na deformacijsko obnašanje kiralnih avksetičnih celičnih struktur, izpostavljenih pogojem večosne obremenitve. Kramberger s sodelavci [3] je raziskoval učinek oblike in porazdelitev osnovnih celic na lomno obnašanje 2D avksetičnih celičnih struktur pri kvazi-statični obremenitvi, medtem ko je Nečemer s sodelavci [8] ta učinek raziskoval pri dinamični ciklični obremenitvi. Obe raziskavi sta pokazali, da orientacija osnovne celice vpliva na togost strukture ter na smer širjenja poškodbe, medtem ko na dolžino dobe trajanja ne vpliva. Isti avtorji so v delu [7] z uporabo eksperimentalnega in numeričnega pristopa raziskovali obnašanje kiralne in vbočene šestkotne avksetične strukture, izdelane iz aluminijeve zlitine 5083-H111. Eksperimentalni in numerični rezultati so pokazali, da je kiralna struktura v primerjavi z vbočeno šestkotno strukturo manj toga, medtem ko pri višjih amplitudnih deformacijah vzdrži daljšo dobo trajanja.

V tem delu je predstavljena numerična raziskava odpornosti na utrujanje različnih dvodimenzionalnih avksetičnih satovij, izdelanih iz aluminijeve zlitine 5083-H111. Ta raziskava temelji na predhodnem raziskovalnem delu, kjer je bil numerični model zgrajen in potrjen [7]. V tem raziskovalnem delu je analiziranih pet geometrijsko različnih avksetičnih satovij, ki so prikazana na sliki 1.

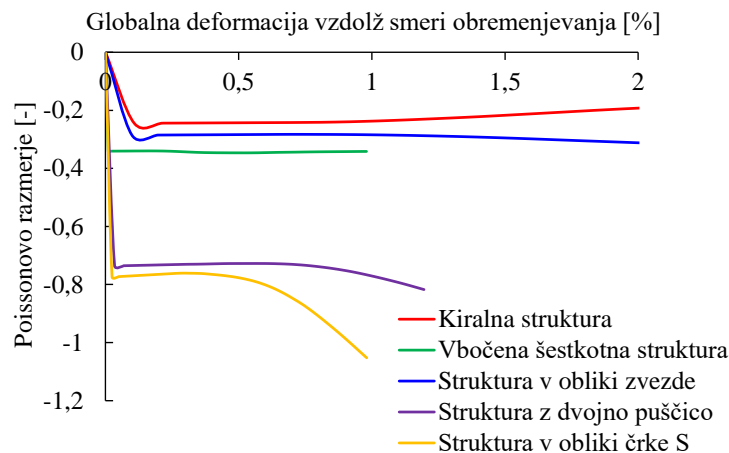


**Slika 1:** Analizirane geometrije avksetičnih satovij: (a) kiralna struktura; (b) struktura v obliki zvezde; (c) struktura v obliki črke S; (č) struktura z dvojno puščico in (d) vbočena šestkotna struktura.

Analizirane geometrije satovij, ki so prikazane na sliki 1, so modelirane z enako debelino medceličnih povezav, ki znaša 1,6 mm, in skoraj enako relativno poroznostjo  $\rho_r \approx 70\%$ , ki je definirana z enačbo:

$$\rho_r = \frac{V_{osnovni\ material}}{V_{pore} + V_{osnovni\ material}}. \quad (1)$$

Poleg oblike osnovne celice se analizirana avksetična satovja med seboj razlikujejo v Poissonovem razmerju, ki je opredeljeno z razmerjem deformacije v smeri x-osi in y-osi. V predstavljeni študiji je bilo Poissonovo razmerje analiziranega avksetičnega satovja izračunano iz globalne deformacije, dobljene iz elasto-plastične numerične analize. Razmerje med Poissonovim razmerjem in deformacijo vzdolž smeri obremenitve je prikazano na sliki 2. Iz numeričnih rezultatov je razvidno, da je bilo najnižje (negativno) Poissonovo razmerje opaženo na kiralni strukturi, medtem ko je bilo najvišje Poissonovo razmerje doseženo v avksetični strukturi v obliki črke S.



Slika 2: Poissonovo razmerje analiziranih avksetičnih geometrij

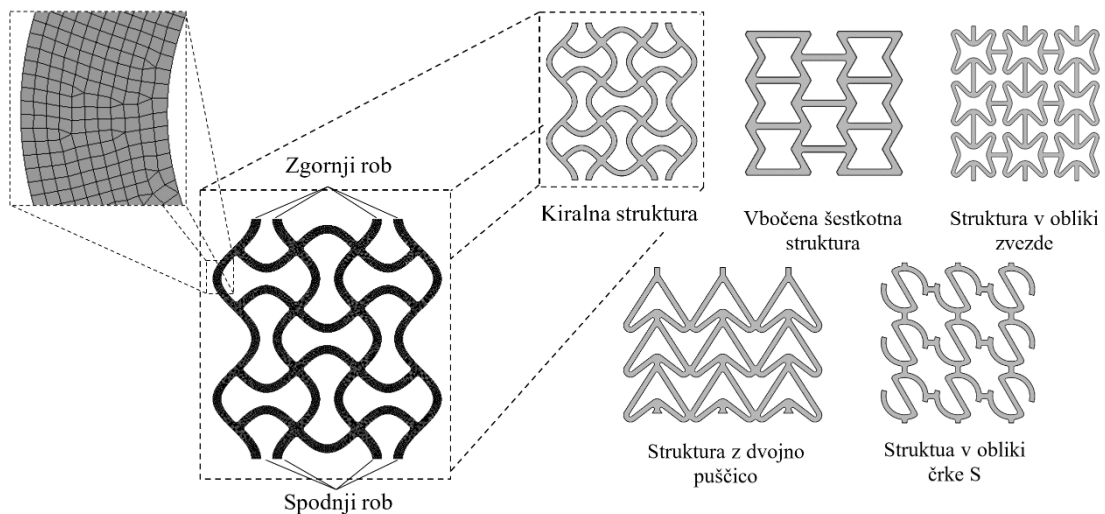
## 2 Numerični model

Kot je zapisano že v uvodu, predstavljena študija temelji na predhodnem raziskovalnem delu avtorjev [7], kjer je bil numerični model zgrajen in potrjen v programskem okolju ANSYS Mechanical. V numeričnem modelu je bila za material analiziranih struktur privzeta aluminijeva zlitina z materialno oznako 5083-H111. Za materialni model je bil privzet multilinear elasto-plastični materialni model, v katerem je bil elastičen del obnašanja materiala definiran z Youngovim modulom  $E = 68656$  MPa in Poissonovim razmerjem  $\nu = 0,33$ , plastični del pa je bil modeliran z definiranjem plastičnega dela ciklične krivulje napetost-deformacija osnovnega materiala. Uporabljeni podatki plastičnega dela ciklične krivulje so podani v tabeli 1.

**Tabela 1:** Plastični del ciklične krivulje

Podatkovni par	$\epsilon_{pl}$ [-]	$\sigma$ [MPa]
1.	0	270
2.	0.001	280
3.	0.002	290
4.	0.005	300
5.	0.013	310
6.	0.030	320
7.	0.071	330

Numerične analize analiziranih geometrij so bile izvedene v kontroli deformacije ( $R = -1$ ) pri različnih vrednostih amplitudnih deformacij. Robni pogoji vpetja in obremenitve so bili predpisani na robove geometrije (slika 3). V numeričnem modelu je bilo vpetje izvedeno na spodnjem robu z vpetjem pomikov v smeri y-osi, medtem ko je bil pomik strukture v isti smeri (y-os) predpisan na zgornji rob strukture. Pomik v numerični analizi je bil definiran kot en zaprt sinusni obremenitveni cikel, kontroliran na celotni dolžini analizirane geometrije. V numeričnem modelu so bile analizirane geometrije, zamrežene z 2D ravninsko napetostnimi linearnimi končnimi elementi s skupno globalno velikostjo elementa 0,15 mm. Na koncu je bila posamezna geometrija zamrežena z ~30000 končnimi elementi.



**Slika 3:** Robni pogoji

Za izračun dobe trajanja analiziranih struktur je bila uporabljena deformacijska metoda, ki temelji na Coffin-Mansonovem modelu z upoštevanjem Morrove korekcije srednje napetosti. Uporabljena metoda je definirana z enačbo:

$$\varepsilon_a = \frac{\sigma_f' - \sigma_m}{E} (2N)^b + \varepsilon_f' (2N)^c, \quad (2)$$

kjer je  $N$  število obremenitvenih ciklov do iniciacije poškodbe,  $\varepsilon_a$  je skupna amplitudna deformacija,  $E$  je Youngov modul,  $\sigma_f'$  je koeficient trdnosti pri utrujanju,  $b$  je eksponent trdnosti pri utrujanju,  $\varepsilon_f'$  je koeficient duktilnosti pri utrujanju,  $c$  je eksponent duktilnosti pri utrujanju in  $\sigma_m$  je srednja napetost. V okviru programske opreme ANSYS so bili materialni parametri deformacijske metode  $\sigma_f'$ ,  $b$ ,  $\varepsilon_f'$  in  $c$ , ter materialna parametra ciklične krivulje  $K'$  in  $n'$  Ramberg-Osgoodove konstitutivne enačbe integrirani v uporabljeni materialni model. Uporabljeni utrujenostni materialni parametri, ki jih navaja tabela 2, so bili predhodno pridobljeni iz malocikličnih eksperimentalnih testov, izvedenih na nateznih vzorcih, izdelanih iz aluminijeve zlitine 5083-H111. Več informacij o samih eksperimentalnih testih je podano v raziskovalnem delu [5].

**Tabela 2:** Utrujenostni materialni parametri aluminijeve zlitine 5083-H111

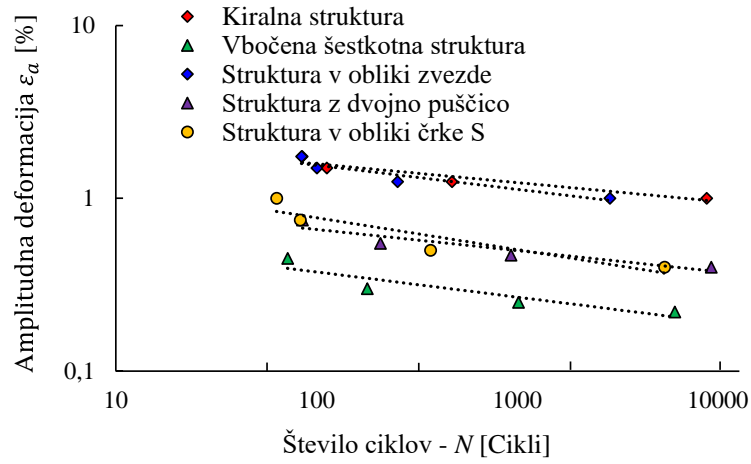
Ciklični koeficient trdnosti	$K'$ [MPa]	430
Ciklični eksponent deformacijskega utrujevanja	$n'$ [-]	0,069
Koeficient trdnosti pri utrujanju	$\sigma_f'$ [MPa]	1425,9
Eksponent trdnosti pri utrujanju	$b$ [-]	-0,2031
Koeficient duktilnosti pri utrujanju	$\varepsilon_f'$ [-]	0,054
Eksponent duktilnosti pri utrujanju	$c$ [-]	-0,5946

### 3 Numerični rezultati

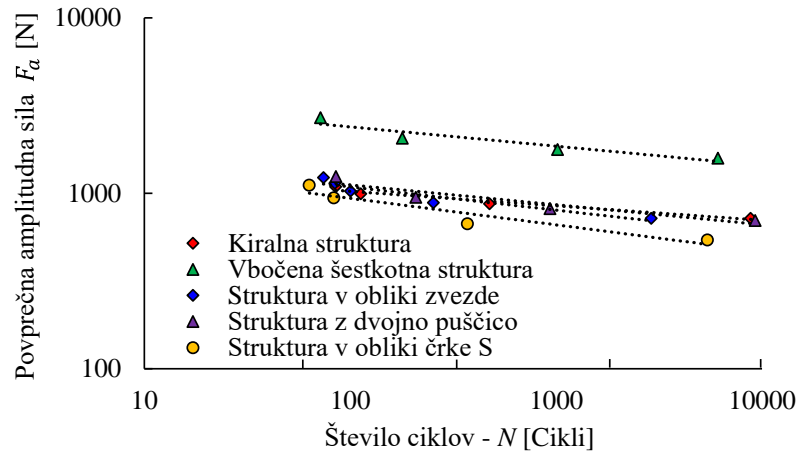
V tem poglavju so predstavljeni numerični rezultati izračuna dobe trajanja različnih avksetičnih satovij. Numerične analize so bile izvedene na različnih nivojih amplitudnih deformacij. Pri določevanju dobe trajanja je bila uporabljena deformacijska metoda z upoštevanjem Morrove korekcije srednje napetosti. Zaradi različnih togosti analiziranih struktur so numerični rezultati predstavljeni v treh različnih oblikah vzdržljivostnih krivulj:

- vzdržljivostna krivulja  $\varepsilon_a - N$  na sliki 4, ki predstavlja odvisnost amplitudne deformacije ( $\varepsilon_a$ ) od števila ciklov do iniciacije poškodbe vzorca ( $N$ ),
- vzdržljivostna krivulja  $F_a - N$  na sliki 5, ki predstavlja odvisnost amplitudne sile ( $F_a$ ) od števila ciklov do iniciacije poškodbe vzorca ( $N$ ), in
- vzdržljivostna krivulja  $\Delta w - N$  na sliki 6, ki predstavlja odvisnost povprečne deformacijske energije na cikel ( $\Delta w$ ) od števila ciklov do iniciacije poškodbe vzorca ( $N$ ).

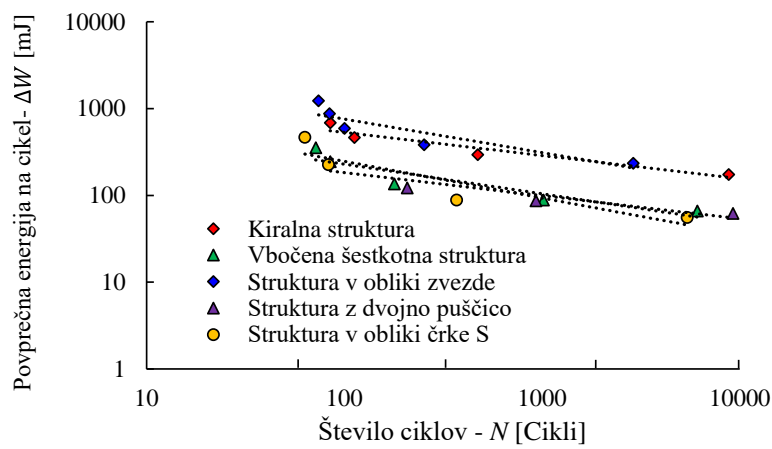




Slika 4:  $\varepsilon_a - N$  vzdržljivostna krivulja



Slika 5:  $F_a - N$  vzdržljivostna krivulja



Slika 6:  $\Delta W - N$  vzdržljivostna krivulja

Iz numeričnih rezultatov, predstavljenih na slikah 4 do 6, je razvidno, da doba trajanja kiralne strukture in strukture v obliki zvezde sovpadata v vseh treh predstavitvenih oblikah vzdržljivostnih krivulj. Omenjeni dve strukturi imata najvišjo odpornost na utrujanje pri višjih amplitudnih deformacijah v primerjavi z drugimi analiziranimi avksetičnimi satovji. Iz numeričnih rezultatov, prikazanih na sliki 4, je razvidno, da ima vbočena šestkotna struktura najnižjo dobo trajanja v primerjavi z ostalimi strukturami, pri čemer je potrebno izpostaviti (slika 5), da hkrati vzdrži višje obremenitve v primerjavi z drugimi analiziranimi strukturami, katerih togost je zelo podobna. Iz numeričnih rezultatov, predstavljenih na sliki 6, je razvidno, da imata kiralna struktura in struktura v obliki zvezde najvišjo stopnjo akumulacije deformacijske energije v enem obremenitvenem ciklu.

#### 4 Zaključki

V okviru omenjene raziskave je bila izvedena numerična študija obstojnosti petih različnih avksetičnih satovij, izdelanih iz aluminijeve zlitine 5083-H111. Numerične analize so bile izvedene s programskim paketom ANSYS. Za izračun dobe trajanja je bila uporabljena deformacijska metoda, ki temelji na Coffin-Mansonovem modelu z upoštevanjem Morrove korekcije srednje napetosti. Na podlagi dobljenih numeričnih rezultatov lahko naredimo naslednje zaključke:

- Iz elasto-plastične računalniške analize je razvidno, da se analizirane geometrije avksetičnih satovij med seboj poleg osnovne celice razlikujejo še po Poissonovem razmerju. Iz numeričnih rezultatov je razvidno, da je bilo najnižje (negativno) Poissonovo razmerje opaženo za kiralno strukturo, medtem ko je bilo najvišje Poissonovo razmerje doseženo v avksetični strukturi v obliki črke S.
- Numerični rezultati so pokazali, da imajo obravnavane strukture med seboj različno togost. Na podlagi te ugotovitve so bili numerični rezultati predstavljeni v treh različnih oblikah:
  - Iz  $\varepsilon_a - N$  vzdržljivostnih krivulj dobe trajanja je bilo ugotovljeno, da kiralna struktura in struktura v obliki zvezde dosežata bistveno daljšo življenjsko dobo kot druge preostale analizirane avksetične strukture pri enaki amplitudi deformacije  $\varepsilon_a$ .
  - Iz  $F_a - N$  vzdržljivostnih krivulj dobe trajanja je razvidno, da vbočena šestkotna avksetična struktura vzdrži višje obremenitve v primerjavi z drugimi analiziranimi strukturami, pri čemer je potrebno izpostaviti, da doseže najnižjo dobo trajanja pri višjih amplitudnih deformacijah v primerjavi s preostalimi strukturami.
  - Iz  $\Delta W - N$  vzdržljivostnih krivulj dobe trajanja je bilo ugotovljeno, da kiralna struktura in struktura v obliki zvezde omogočata najvišjo stopnjo akumulacije deformacijske energije v enem obremenitvenem ciklu.

#### Zahvala

Avtorji se zahvaljujejo Javni agenciji za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije za sofinanciranje raziskovalnega programa št. P2-0063.

## Literatura

- [1] J. B. Choi and R. S. Lakes, *Nonlinear properties of metallic cellular materials with a negative Poisson's ratio*, J. Mater. Sci., vol. 27, pp. 5375–5381, 1992.
- [2] S. Hou, T. Liu, Z. Zhang, X. Han, and Q. Li, *How does negative Poisson's ratio of foam filler affect crashworthiness?*, Mater. Des., vol. 82, pp. 247–259, Oct. 2015.
- [3] J. Kramberger, B. Nečemer, and S. Glodež, *Assessing the cracking behavior of auxetic cellular structures by using both a numerical and an experimental approach*, Theor. Appl. Fract. Mech., vol. 101, pp. 17–24, Jun. 2019.
- [4] K. Meena and S. Singamneni, *A new auxetic structure with significantly reduced stress concentration effects*, Mater. Des., vol. 173, p. 107779, Jul. 2019.
- [5] B. Nečemer, F. Zupanič, D. Gabriel, E. A. Tarquino, M. Šraml, and S. Glodež, *Low cycle fatigue behaviour of ductile aluminium alloys using the inelastic energy approach*, Mater. Sci. Eng. A, vol. 800, no. October 2020, 2021.
- [6] B. Nečemer, J. Klemenc, and S. Glodež, *The computational LCF-analyses of chiral and Re-entrant auxetic structure using the direct cyclic algorithm*, Mater. Sci. Eng. A, vol. 789, no. May, 2020.
- [7] B. Nečemer, J. Klemenc, F. Zupanič, and S. Glodež, *Modelling and predicting of the LCF-behaviour of aluminium auxetic structures*, Int. J. Fatigue, vol. 156, p. 106673, Mar. 2022.
- [8] B. Nečemer, J. Kramberger, T. Vuherer, and S. Glodež, *Fatigue crack initiation and propagation in re-entrant auxetic cellular structures*, Int. J. Fatigue, vol. 126, no. May, pp. 241–247, Sep. 2019.
- [9] B. Nečemer, M. Vesenjajk, and S. Glodež, *Fatigue of Cellular Structures – a Review*, Strojniški Vestn. – J. Mech. Eng., vol. 65, no. 9, pp. 525–536, Aug. 2019.
- [10] B. Nečemer, S. Glodež, N. Novak, and J. Kramberger, *Numerical modelling of a chiral auxetic cellular structure under multiaxial loading conditions*, Theor. Appl. Fract. Mech., vol. 107, 2020.



## ***Razvoj in mehanska karakterizacija hibridnih TPMS metamaterialov***

*Nejc Novak<sup>1</sup>, Oraib Al-Ketan<sup>2</sup>, Matej Vesenjak<sup>1</sup> in Zoran Ren<sup>1</sup>*

### ***Development and mechanical characterisation of hybrid Triply Periodical Minimal Surface (TPMS) metamaterials***

**Povzetek.** Mehanske lastnosti hibridnih celičnih struktur na osnovi trojno periodičnih minimalnih površin (ang. »Triply Periodical Minimal Surface – TPMS«), določenih z implicitnimi funkcijami, so bile ovrednotene z eksperimentalnim preizkušanjem in računalniškimi simulacijami. Proučeni sta bili dve hibridni geometriji iz struktur »Gyroid« in »Diamond«, ki tvorita radialne in vzdolžne hibridne strukture. Hibridne geometrije so bile najprej razvite z uporabo računskih modelov v programu LS-DYNA, nato izdelane s pomočjo dodajalnih tehnologij iz nerjavnega jekla 316L in eksperimentalno preizkušene pri kvazi-statičnih in dinamičnih obremenitvenih pogojih. Računski model je bil potrjen za tri različne relativne gostote. Doseženo je bilo dobro ujemanje med rezultati eksperimentalnih preizkusov in računalniških simulacij. Potrjeni računalniški modeli bodo uporabljeni za razvoj novih hibridnih celičnih struktur in ovrednotenje možnosti njihove uporabe v sodobnih naprednih konstrukcijah za zaščito pred trki.

**Abstract.** The mechanical properties of hybrid cellular structures designed using implicit functions are investigated both experimentally and numerically. Two proposed samples are comprised of Gyroid and Diamond unit cells hybridised longitudinally and radially. First, a finite element computational model was utilised in LS-DYNA to capture the mechanical properties of the additively manufactured constituent lattices (i.e., Gyroid and Diamond) made of stainless steel 316L and tested under quasi-static and dynamic loading conditions. The model was validated for three different relative densities. A good agreement between experimental and computational results was achieved. The validated computational models will be used for development of new hybrid cellular structures and evaluation of their crashworthiness performance for protective equipment applications.

## **1 Uvod**

Na področju celičnih struktur potekajo obsežne raziskave njihovih fizikalnih lastnosti za namen njihove uporabe na tehnološkem, medicinskem, modnem in drugih področjih [11]. Zaradi kombinacije nizke teže, visoke sposobnosti absorpcijske energije, dušenja in toplotne

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

<sup>2</sup> New York University Abu Dhabi, Core Technology Platforms Operations

izolacije so eden najbolj obetavnih materialov za izdelke prihodnosti [15]. Uporaba celičnih materialov v funkcionalnih komponentah je vse bolj pogosta zaradi znatnega napredka v proizvodnih procesih in nižanja stroškov izdelave [15].

Nedavni napredek v dodajalnih tehnologijah je omogočil razvoj in izdelavo urejenih, periodičnih celičnih struktur [14]. Periodične enakomerne celične strukture je enostavno oblikovati z uporabo programske opreme za računalniško podprto konstruiranje, njihovo obnašanje pod obremenitvijo pa je predvidljivo zaradi njihove periodičnosti. Obnašanje več vrst enotskih celic periodičnih struktur pri kvazi-statičnih in dinamičnih obremenitvah je bilo temeljito raziskano [5], [19]. Pred kratkim so bile razvite celične strukture s trojno periodično najmanjšo površino (ang. »triply periodic minimal surface – TPMS«), katerih geometrija določajo implicitne funkcije [3], [10]. Al-Ketan et al. [5] je pokazal, da imajo strukture TPMS zgrajene s površinami izboljšane mehanske lastnosti v primerjavi z rešetkastimi (skeletnimi) TPMS in drugimi že poznanimi rešetkami, kot so na primer Kelvinove celice. Enakomerne strukture, sestavljene iz ene vrste enotske celice, ki se periodično ponavlja, so obsežno raziskane. Začetne raziskave kažejo, da imajo lahko hibridne strukture, izdelane iz dveh ali več vrst enotskih celic, še bolj ugodne mehanske lastnosti [13], [16]. Za razvoj novih hibridnih celičnih struktur so zelo uporabne računalniške simulacije, ki omogočajo vnaprejšnje natančno napovedovanje mehanskih lastnosti celičnih struktur [12], [18], [20].

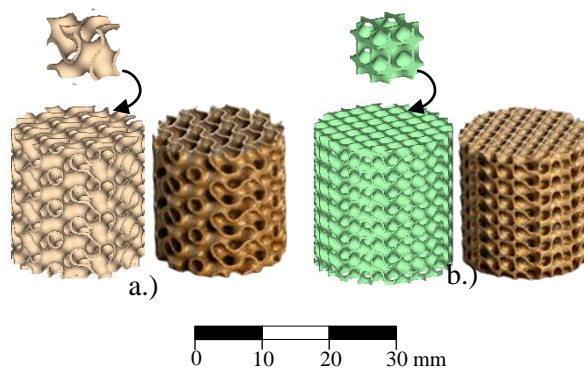
Pred kratkim je bilo raziskanih več materialnih modelov in simulacijskih pristopov za strukture TPMS. Nekatere raziskave so se osredotočile le na elastične lastnosti struktur TPMS [1], [10], medtem ko so druge raziskave uporabljale elastično-idealne plastične konstitutivne modele [2], [4]. Nekaj raziskav je uporabilo bolj zapletene konstitutivne modele za preučevanje deformacijskega obnašanja TPMS struktur pri velikih deformacijah. Večina računalniških raziskav TPMS rešetk na ploščah analizira njihovo obnašanje le pri manjših deformacijah, npr. raziskati elastične lastnosti in mejo tečenja [7]. Le nekaj raziskav proučuje obnašanje TPMS struktur do zgoščevanja z uporabo volumskih končnih elementov (KE), ki so iz vidika računskega časa bistveno obsežnejše [8].

Namen tega dela je (1) raziskati mehanske lastnosti hibridnih (multimorfoloških) metamaterialov s prostorsko spremenljivimi tipi osnovnih celic, zasnovanimi na podlagi implicitnih funkcij, in (2) uporabiti ter pohitrili računalniške modele z uporabo površinskih končnih elementov, z namenom zmanjšati računski čas. Novi računski modeli se lahko uporabljajo tudi za vrednotenje drugih metamaterialov.

## **2 Metode**

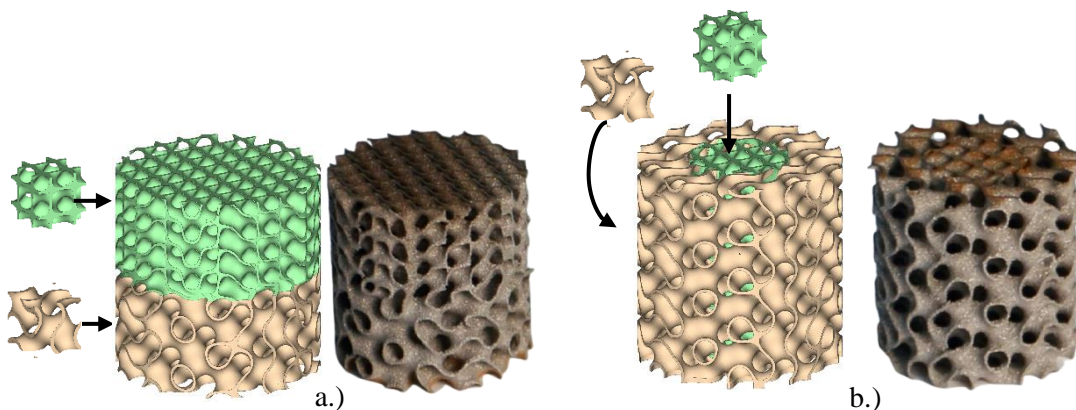
### **2.1 Načrtovanje in razvoj geometrije**

Za namen eksperimentalnega testiranja in potrditve računalniškega modela so bile najprej razvite enakomerne celične strukture dveh tipov TPMS struktur, in sicer: Schwarz Diamond in Schoen Gyroid, vsaka s tremi različnimi relativnimi gostotami ~16 %, ~19 % in ~21 %. Strukture so bile zgrajene v programu MSLattice, ki ga je razvil dr. Al-Ketan in je prosto dostopen na spletu [6]. Računalniški modeli in izdelane strukture so prikazane na sliki 1.



**Slika 1:** Uniformne TPMS strukture: a.) Gyroid in b.) Diamond

V nadaljevanju so bile razvite, računalniško ovrednotene, izdelane in eksperimentalno preizkušene tudi hibridne TPMS strukture. Hibridne strukture z relativno gostoto 16 % so bile razvite s kombinacijo Gyroid in Diamond struktur, razporejenih v vzdolžni ali radialni smeri. Natančna metodologija gradnje takšnih struktur je opisana v [6]. Na sliki 2 so prikazani CAD modeli hibridnih TPMS struktur in z uporabo dodajalnih tehnologij dejansko izdelane strukture.



**Slika 2:** Hibridne TPMS strukture: a.) vzdolžne in b.) radialne

## 2.2 Izdelava

Strukture prikazane na slikah 1 in 2 so bile izdelane s pomočjo dodajalnih tehnologij na EOS M280, ki omogoča 3D lasersko sintranje kovinskih delov iz nerjavnega jekla 316L. Stroj uporablja 400 W iterbijev (Yb) laser s premerom žarka, ki se spreminja med 100  $\mu\text{m}$  in 500  $\mu\text{m}$ , in hitrosti skeniranja do 7 m/s. Plin Po 5 vzorcev posameznih struktur končnih dimenzij  $\text{Ø}20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$  je bilo izrezanih iz osnovne plošče z uporabo žične erozije. Po izdelavi so bili preostali delci prahu v vzorcu odstranjeni s pomočjo peskanja. Dejanska relativna gostota izdelanih struktur je bila določena na podlagi tehtanja in meritev dimenzij vzorcev in je

nekoliko manjša (ne več kot 5 %) od načrtovane v CAD modelih. To je posledica določenih napak pri izdelavi, nepopolni gostoti vzorcev in adheziji delcev prahu na površino.

### 2.3 Mehansko testiranje

Mehansko tlačno testiranje je bilo izvedeno na INSTRON 8801 v skladu s standardom ISO 13314:2011 [21]. Hitrost obremenjevanja je bila konstantna pri 0,1 mm/s (kvazi-statično testiranje) in 284 mm/s (dinamično testiranje). Rezultati testiranja so bili pretvorjeni v inženirske vrednosti napetosti in deformacije na osnovi začetne geometrije vzorcev.

V sklopu dinamičnega testiranja je bila uporabljena tudi infrardeča (IR) termografija (Flir SC 5000) za namen sledenja razvoja plastične deformacije na površini strukture.

### 2.4 Računalniške simulacije

Računalniški modeli TPMS struktur so bili zgrajeni s površinskimi KE na osnovi geometrije iz programa MSLattice in diskretizirani v programu PrePoMax [9]. Nato je bila mreža KE uvožena v Ls-PrePost, kjer so bili predpisani robni pogoji. Debelina površinskih KE je bila določena na podlagi primerjave mas izdelanih struktur in računalniškega modela. Za simulacije je bil uporabljen program LS-DYNA.

Elasto-plastični materialni model (MAT\_024) je bil uporabljen za opis konstitutivnega obnašanja TPMS celičnih struktur. Materialni model je odvisen od hitrosti deformacije, krivulja tečenja pa je podana odsekovno linearno. Za določitev parametrov materialnega modela so bile izvedene inverzne računalniške simulacije, kjer sta bila primerjana eksperimentalna in numerična odziva. Končni parametri materialnega modela so podani v tabeli 1, in sicer gostota  $\rho$ , modul elastičnosti  $E$ , Poissonovo razmerje  $\nu$ , začetna napetost tečenja  $\sigma_{\text{yield}}$ . Za določitev utrjevanja je uporabljena dodatna točka, ki podaja odvisnost napetosti tečenja od plastične deformacije ( $\sigma_2$ ,  $\epsilon_{\text{pl},2}$ ). Pri večjih deformacijah je bila predpostavljena idealna plastičnost  $\epsilon_{\text{pl},2}$  z namenom izogibanja nefizikalnemu brisanju končnih elementov ob predpostavki porušitve.

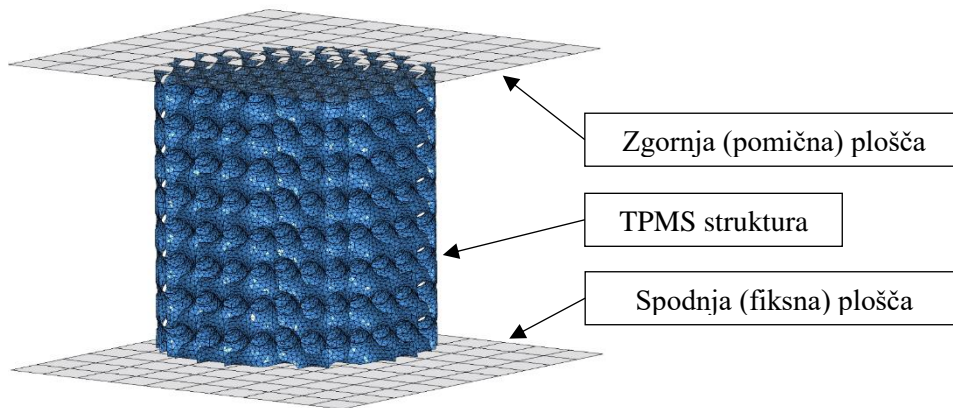
**Tabela 1:** Parametri materialnega modela.

$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	$E$ [GPa]	$\nu$ [-]	$\sigma_{\text{yield}}$ [MPa]	$\sigma_2$ [MPa]	$\epsilon_{\text{pl},2}$ [-]
7850	210	0,3	450	650	0.3

Zgornja in spodnja plošča sta bili modelirani iz linearno-elastičnega materiala z naslednjimi lastnostmi: gostota  $\rho = 7850 \text{ kg/m}^3$ , modul elastičnosti  $E = 210 \text{ GPa}$  in Poissonovo razmerje  $\nu = 0.3$ .

Strukture so bile zamrežene s polno-integriranimi površinskimi KE, katerih velikost je bila določena na podlagi konvergenčne študije s tremi različnimi velikostmi KE. Izbrana velikost KE je bila 0,25 mm, celotna struktura pa je bila zamrežena z okoli 90.000 KE.

Računalniški model je prikazan na sliki 3, kjer ima zgornja plošča predpisano hitrost (2 m/s), spodnja plošča pa ima omejene vse prostostne stopnje. Zvišanje hitrosti v računalniškem modelu v primerjavi z eksperimentalnim testiranjem je bilo uporabljeno za zmanjšanje računskega časa in ustreznost le-tega pa ovrednotena na podlagi parametričnih računalniških simulacij. V strukturi je bil predpisan kontakt s trenjem med površinskimi KE (statični koeficient trenja je znašal 0,36, dinamični koeficient trenja pa 0,34).



Slika 3: Računalniški model TPMS strukture.

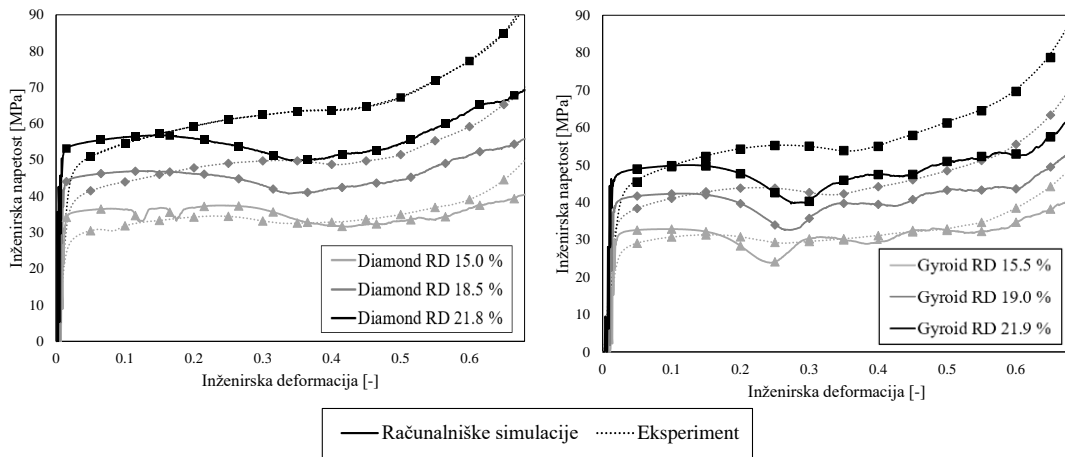
### 3 Rezultati

Rezultati eksperimentalnih preizkusov in računalniških simulacij uniformnih Gyroid in Diamond TPMS struktur so prikazani na sliki 4.

Celoten mehanski odziv je primerljiv, pri čemer je opazen tipičen odziv celičnega materiala, kjer elastičnemu začetnemu odzivu, sledi napetostni plato in nato zgoščevanje. Eksperimentalno se s povečanjem relativne gostote povečuje naklon napetostnega platoja. To je posledica lokalnega zgoščevanja, ki pri večjih relativnih gostotah poteka pri manjših deformacijah. Računski rezultati kažejo konstantno napetost platoja do vrednosti deformacije okoli 35 %, po kateri se napetost začne povečevati. Računalniški model dovolj dobro zajame tudi potek zgoščevanja.

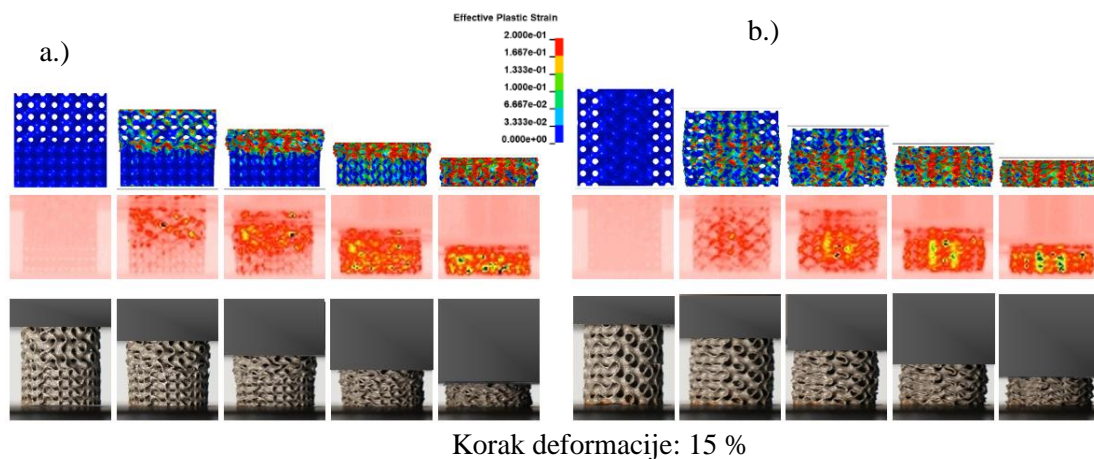
V primeru Gyroid struktur je eksperimentalna napetost platoja skoraj konstanta do 35 % deformacije, kjer se pojavi učinek lokalnega zgoščevanja, naklon napetostnega platoja pa narašča. Mehanski odziv v računalniških simulacijah kaže izrazitejši padec napetosti v območju platoja in poteka pri manjših deformacijah (25 % – 29 %).





**Slika 4:** Primerjava rezultatov eksperimentov in računalniških simulacij enakomernih TPMS struktur

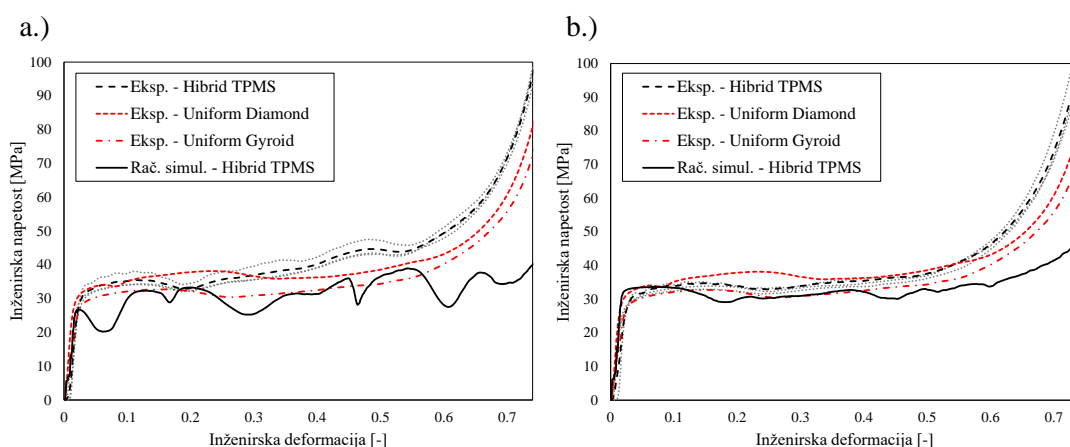
Deformacijsko obnašanje vzdolžnih in radialnih hibridnih TPMS struktur je prikazano na sliki 5. V smislu deformacijskega obnašanja je mogoče opaziti splošno dobro ujemanje med eksperimenti in računalniškimi simulacijami. Pri vzdolžnih hibridnih vzorcih se najprej deformira Gyroid struktura, ki je manj toga od Diamond strukture. Medtem ko računalniški modeli kažejo na lokalizacijo plastične deformacije na stiku dveh različnih struktur, IR slike nakazujejo nastanek strižne ravnine v območju Gyroid strukture. Večina deformacije poteka v območju Gyroid strukture do 15% deformacije, nato pa se plastična deformacija začne skoraj enakomerno širiti do območja Diamond strukture. V primeru radialne hibridne strukture, kjer je bolj toga Diamond struktura postavljena v središče strukture in je radialno obdana z manj togo Gyroid strukturo, je deformacija porazdeljena bolj enakomerno. Tako računalniške simulacije kot IR slike kažejo na lokalizacijo napetosti na stiku obeh struktur (Slika 5b).



**Slika 5:** Eksperimentalni deformacijski odzivi hibridnih TPMS struktur (vzdolžno a.) in radialno b.) gradirane) in primerjava z računalniškimi simulacijami

Mehanski odzivi enakomernih in hibridnih TPMS struktur so prikazani na sliki 6. Odziv vzdolžnih hibridnih struktur pri nižjih deformacijah je primerljiv z odzivom enakomernih Gyroid in Diamond struktur (slika 6a). Pri večjih deformacijah zgodnje zgoščevanje Gyroid strukture in prispevek Diamond strukture povzročita zvišanje napetostnega platoja. V primeru vzdolžnih hibridnih struktur (slika 6a) je mogoče opaziti, da je simulacijski odziv manj tog kot eksperimentalni odziv, zlasti pri nižjih deformacijah, kar je posledica računsko podcenjenih napetosti platoja za Gyroid strukture (slika 4).

Odziv radialnih hibridnih struktur je prikazan na sliki 6b. Napetostni plato je bolj enakomeren in konstanten kot v primeru vzdolžnih hibridnih struktur. Računski in eksperimentalni rezultati so v primeru radialnih hibridnih struktur v boljši korelaciji kot pri vzdolžnih hibridnih strukturah, kar je posledica kombinirane deformacije obeh geometrij.



**Slika 6:** Eksperimentalni mehanski odzivi uniformnih in hibridnih TPMS struktur (vzdolžno a.) in radialno b.) gradirane) in primerjava z računalniškimi simulacijami

#### 4 Zaključek

V delu je predstavljen razvoj in izdelava hibridnih TPMS struktur ter analiza njihovega mehanskega obnašanja. Najprej so bili razviti in potrjeni računalniški modeli enakomernih TPMS struktur. Potrditev računalniških modelov je bila opravljena z uporabo kvazi-statičnih eksperimentalnih rezultatov iz predhodnega dela [17]. Razvoj računalniškega modela za računalniške simulacije s programom LS-DYNA je obsegal gradnjo geometrij v MSLattice, mreženje v PrePoMax in uvoz v LS-PrePost, kjer so bili predpisani robni pogoji. Potrjeni računalniški modeli predvidijo pravilno deformacijsko obnašanje struktur do zgoščevanja v primerjavi z eksperimenti. Glavni razlog za določeno neskladje v odzivih je priprava računskih modelov, ki temeljijo na površinskih končnih elementih. To bi lahko izboljšali z uporabo volumskih končnih elementov, kar pa bi povzročilo znatno podaljšanje računskih časov in težave s stabilnostjo preračuna pri večjih deformacijah. Kljub temu rezultati potrjujejo, da so površinski končni elementi primerni za računalniške simulacije TPMS struktur.

Na podlagi potrjenih računskih modelov enakomernih struktur so bile razvite, izdelane in ovrednotene vzdolžne in radialne hibridne TPMS struktur, sestavljene iz Diamond in Gyroid

struktur. Vzdolžne hibridne strukture izkazujejo utrjevanje (naklon območja napetostnega platoja) zaradi zaporednih deformacij in zgoščevanja manj toge Gyroid strukture po plasteh, čemur sledi bolj nadzorovana deformacija in zgoščevanje toge Diamond strukture. Napetostni plato je v radialnih hibridnih strukturah veliko bolj enakomeren in konstanten zaradi sočasne deformacije radialno razporejenih struktur.

## Zahvala

Avtorji se zahvaljujejo Javni agenciji za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije za sofinanciranje raziskovalnega programa št. P2-0063 in temeljnega podoktorskega raziskovalnega projekta št. Z2-2648.

## Literatura

- [1] D. W. Abueidda, R. K. Abu Al-Rub, A. S. Dalaq, D.-W. Lee, K. A. Khan, I. Jasiuk, *Effective conductivities and elastic moduli of novel foams with triply periodic minimal surfaces*, Mech. Mater., 95, 102–115, 2016.
- [2] M. Afshar, A. Pourkamali Anaraki, H. Montazerian, *Compressive characteristics of radially graded porosity scaffolds architected with minimal surfaces*, Mater. Sci. Eng. C, 92, 254–267, 2018.
- [3] O. Al-Ketan, R. K. Abu Al-Rub, *Multifunctional Mechanical Metamaterials Based on Triply Periodic Minimal Surface Lattices*, Adv. Eng. Mater., 21, 2019.
- [4] O. Al-Ketan, R. K. Abu Al-Rub, R. Rowshan, *The effect of architecture on the mechanical properties of cellular structures based on the IWP minimal surface*, J. Mater. Res., 33, 2018.
- [5] O. Al-Ketan, R. Rowshan, R. K. Abu Al-Rub, *Topology-mechanical property relationship of 3D printed strut, skeletal, and sheet based periodic metallic cellular materials*, Addit. Manuf., 19, 2018.
- [6] O. Al-Ketan, R. K. Abu Al-Rub, *MSLattice: A free software for generating uniform and graded lattices based on triply periodic minimal surfaces*, Mater. Des. Process. Commun., 3, 1–10, 2021.
- [7] C. Bonatti, D. Mohr, *Mechanical performance of additively-manufactured anisotropic and isotropic smooth shell-lattice materials: Simulations & experiments*, J. Mech. Phys. Solids, 122, 1–26, 2019.
- [8] C. Bonatti, D. Mohr, *Smooth-shell metamaterials of cubic symmetry: Anisotropic elasticity, yield strength and specific energy absorption*, Acta Mater., 164, 301–321, 2019.
- [9] M. Borovinšek, *PrePoMax*. <https://prepomax.fs.um.si/>
- [10] A. S. Dalaq, D. W. Abueidda, R. K. Abu Al-Rub, I. M. Jasiuk, *Finite element prediction of effective elastic properties of interpenetrating phase composites with architected 3D sheet reinforcements*, Int. J. Solids Struct., 83, 169–182, 2016.
- [11] L. J. Gibson, M. F. Ashby, *Cellular Solids: Structure and properties*. Cambridge, U.K.: Cambridge University Press, 1997.
- [12] G. Imbalzano, P. Tran, T. D. Ngo, P. V. S. Lee, *A Numerical Study of Auxetic Composite Panels under Blast Loadings*, Compos. Struct., 135, 339–352, 2015.
- [13] H. Jia *et al.*, *An experimental and numerical investigation of compressive response of designed Schwarz Primitive triply periodic minimal surface with non-uniform shell*

- thickness*, Extrem. Mech. Lett., 37, 100671, 2020.
- [14] C. Körner, *Additive manufacturing of metallic components by selective electron beam melting — a review*, Int. Mater. Rev., 61, 361–377, 2016.
- [15] D. Lehmus, M. Vesenjaj, S. de Schampheleire, T. Fiedler, *From stochastic foam to designed structure: Balancing cost and performance of cellular metals*, Materials (Basel), 10, 1–32, 2017.
- [16] A. Najibi, P. Ghazifard, P. Alizadeh, *Numerical crashworthiness analysis of a novel functionally graded foam-filled tube*, J. Sandw. Struct. Mater., 23, 1635–1661, 2021.
- [17] N. Novak *et al.*, *Quasi-static and dynamic compressive behaviour of sheet TPMS cellular structures*, Compos. Struct., 266, 1–10, 2021.
- [18] N. Novak *et al.*, *Crushing Behavior of Graded Auxetic Structures Built from Inverted Tetrapods under Impact*, Phys. Status Solidi B, 256, 1–7, 2018.
- [19] N. Novak, M. Vesenjaj, L. Krstulović-Opara, Z. Ren, *Mechanical characterisation of auxetic cellular structures built from inverted tetrapods*, Compos. Struct., 196, 96–107, 2018.
- [20] M. Vesenjaj, F. Gačnik, L. Krstulović-Opara, Z. Ren, *Mechanical Properties of Advanced Pore Morphology Foam Elements*, Mechanics of Advanced Materials and Structures, 22, 359–366, 2015.
- [21] *ISO 13314:2011 - Mechanical testing of metals - ductility testing - compression test for porous and cellular metals*. Geneva, Switzerland: International Organization for Standardization, 2011. [Online]. Available: [www.iso.org](http://www.iso.org)



## *Konstitutivni model za nelinearne anizotropne materiale z nesimetričnim odzivom*

Štefan Obid<sup>1</sup>, Miroslav Halilovič<sup>1</sup> in Bojan Starman<sup>1</sup>

### *A constitutive model for non-linear anisotropic materials with asymmetric response*

**Povzetek.** Predstavljen je nov fenomenološki konstitutivni model za obravnavanje polimernih kompozitov, ojačanih z vlakni. Model omogoča opis treh bistvenih mehanskih lastnosti teh materialov: anizotropija, nelinearnost ter asimetrija materialnega odziva v natezno in tlačno obremenjenih stanjih. Model je osnovan na nelinearni Ramberg-Osgoodovi relaciji, asimetrija odziva pa je implementirana z odvisnostjo od troosnosti napetostnega stanja. Predstavljen konstitutivni model je verificiran na eksperimentalnih podatkih, kjer so opazne dobre napovedne sposobnosti.

**Abstract.** A novel phenomenological constitutive model is presented for fibre reinforced polymer composites. The model allows for the description of three fundamental properties of such materials: anisotropy, non-linearity and asymmetric material response in tension and compression load states. The model is based on the non-linear Ramberg-Osgood relation, where tension-compression asymmetry is implemented with stress triaxiality dependency. The presented model is verified on experimental data, showing good predictive abilities.

## 1 Uvod

Pri snovanju konstrukcij in izdelkov se vedno več uporabljajo polimerni kompoziti, ojačani z vlakni. Ti materiali so zelo lahki in imajo odlične mehanske lastnosti, zaradi česar se še posebej uporabljajo v letalstvu, navtiki, avtomobilizmu, športu in na mnogih drugih področjih. Ena najbolj značilnih lastnost teh materialov je anizotropija, ki je posledica usmerjenosti ojačitvenih vlaken. Poleg anizotropije je zanje značilna tudi nelinearnost, ki je opazna že pri manjših deformacijah [4] in se pojavi zaradi polimerne matrice. Nelinearen odziv je še posebej izrazit pri obremenjevanju izven glavnih smeri ojačitvenih vlaken, kjer je togost matrice prevladujoča. Še ena pomembna značilnost pa je nesimetričnost mehanskega odziva pri nateznem ter tlačnem

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

obremenjevanju. Glavni vzrok so ojačitvena vlakna, ki pri nateznem obremenjevanju v veliki meri doprinesejo k togosti materiala, pri tlačnem obremenjevanju pa le-ta lahko uklonijo zaradi fleksibilnosti in poroznosti polimerne matrice [8].

Slednje mehanske lastnosti predstavljajo velik izziv z vidika konstitutivnega modeliranja, kar pa je ključno za namen izvajanja verodostojnih mehanskih analiz. Prvi poizkus modeliranja asimetričnega materialnega odziva v 2D sta predstavila Ambartsumian in Khachatrian [1], ki sta za ortotropen material uvedla odvisnost komponent prožnostnega tenzorja od predznaka glavnih napetosti. Problem tega modela je nesimetričen prožnostni tenzor, kar pa sta s sorodnim modelom odpravila Jones [5] in Bert [2]. Različne variacije modelov, kjer je asimetrija odziva dosežena na podoben način, so kasneje predstavili Patel s sod. [10], Vijayakumar in Rao [13] ter Zhang s sod. [14], ki je model razširil na 3D. Latorre s sod. [6] in Du s sod. [3] sta za obravnavanje materialov pri večjih deformacijah predstavila hiperelastične modele, kjer sta asimetrijo materialnega odziva dosegla z uvedbo odvisnosti materialnih parametrov v odvisnosti od predznakov glavnih napetosti oz. deformacij. Nekoliko drugačen pristop za snovanje tovrstnih modelov je predstavil Lomakin s sod. [7, 9], kjer je parametre ortotropnega materiala definiral kot funkcijo troosnosti napetostnega stanja, ki v tem primeru služi kot indikator tipa napetostnega stanja.

Iz pregleda področja je razvidno, da za modeliranje materialov, kot so polimerni kompoziti ojačani z vlakni, ni enotnega modela niti enotnega pristopa modeliranja. Za opis posamičnih mehanskih lastnosti, kot so anizotropija, nelinearnost ter asimetrija materialnega odziva, konstitutivni modeli že obstajajo, redko pa zasledimo modele, ki so zmožni zajeti vse prej navedene značilnosti. V nadaljevanju je predstavljen nov fenomenološki model, ki temelji na nelinearni Ramberg-Osgoodovi relaciji [11] in je odvisen od troosnosti napetostnega stanja. Model omogoča opis vseh lastnosti, značilnih za ojačane polimerne kompozite, in je omejen za obravnavanje majhnih deformacij ter monotono obremenjevanje v primerih, kjer se pojavijo razni ireverzibilni procesi (nastajanje razpok ipd.).

## 2 Postavitev konstitutivnega modela

V prvem delu je predstavljena generalizacija Ramberg-Osgoodove relacije na nelinearno elastičen anizotropen model. V drugem delu pa je prikazana še implementacija odvisnosti od troosnosti napetostnega stanja, s čimer bo omogočen asimetričen materialen odziv pri nateznem in tlačnem obremenjevanju.

### 2.1 Generalizacija Ramberg-Osgoodove relacije

Da zagotovimo termodinamsko konsistentnost modela, izhajamo iz gostote deformacijske energije, na podlagi katere bomo nato izpeljali konstitutivno relacijo. Gostoto deformacijske energije Ramberg-Osgoodove relacije lahko zapišemo kot

$$C = \frac{\sigma^2}{2G} + \frac{\zeta^{n-1}}{n+1} \frac{\sigma^2}{K}, \quad (1)$$

kjer je  $G$  strižni modul,  $K$  sekantni modul,  $n$  eksponent,  $\zeta$  pa invariants definirana kot  $\sqrt{(\sigma/K)^2}$ , za katero vedno velja  $\zeta \geq 0$ . Gostoto deformacijske energije (1) sedaj generaliziramo za

večosno napetostno stanje:

$$C = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{S} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{\zeta^{n-1}}{n+1} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{N} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (2)$$

kjer je  $\mathbb{S}$  linearni,  $\mathbb{N}$  pa nelinearni prožnostni tenzor. Oba prožnostna tenzorja izpolnjujeta simetrijske pogoje  $\mathbb{S}_{ijkl} = \mathbb{S}_{klij}$  ter  $\mathbb{S}_{ijkl} = \mathbb{S}_{jikl} = \mathbb{S}_{ijlk} = \mathbb{S}_{jilk}$  (enako velja za  $\mathbb{N}$ ). Invarianto v tem primeru zapišemo kot  $\zeta = \sqrt{\boldsymbol{\sigma} : \mathbb{N} : \boldsymbol{\sigma}}$ . Z odvajanjem generalizirane oblike deformacijske energije (2) dobimo konstitutivno zvezo, ki jo lahko zapišemo v naslednji obliki:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\partial C}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{S} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{\zeta^{n-1}}{n+1} \left( (n-1) \frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbb{N} : \boldsymbol{\sigma}}{\zeta^2} \mathbb{N} + 2 \mathbb{I}^{\text{sim}} \right) : \boldsymbol{\sigma}, \quad (3)$$

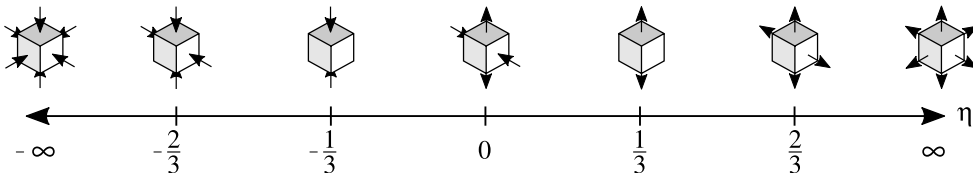
kjer je  $\mathbb{I}^{\text{sim}}$  simetrična identiteta četrtega reda. Dobljena konstitutivna relacija (3) je sestavljena iz linearnega ter nelinearnega člena. Linearni člen ima identično obliko kot klasičen linearno izotropen model, linearni tenzor  $\mathbb{S}$  pa je v resnici klasičen prožnostni tenzor, katerega parametre lahko določimo na konvencionalen način. Nelinearen odziv konstitutivnega modela je definiran z velikostjo eksponenta  $n$  ter nelinearnim prožnostnim tenzorjem  $\mathbb{N}$ , ki ima v osnovi enako obliko kot linearen tenzor  $\mathbb{S}$ . V primeru, da je le-ta enak nič ( $\mathbb{N}_{ijkl} = 0$ ), se model poenostavi na klasično linearno anizotropen model.

## 2.2 Vpeljava troosnosti napetostnega stanja

Konstitutivna zveza (3) je neobčutljiva na vrsto obremenitvenega stanja (tj. natezno oz. tlačno), za kar bomo v nadaljevanju poskrbeli z vpeljavo odvisnosti od troosnosti napetostnega stanja. Troosnost napetostnega stanja  $\eta$  je invarianta, definirana kot razmerje med hidrostatičnim tlakom ter von Misesovo primerjalno napetostjo

$$\eta = \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\sigma})/3}{\sqrt{3/2} \boldsymbol{s} : \boldsymbol{s}}, \quad (4)$$

kjer je  $\boldsymbol{s}$  deviator napetostnega tenzorja  $\boldsymbol{\sigma}$ . Slika 1 prikazuje zvezo med posameznimi obremenitvenimi stanji ter njim pripadajočim vrednostim troosnosti napetostnega stanja. Opazimo lahko, da večja kot je njena absolutna vrednost, bolj je obremenitev enakomerna v vseh treh oseh. Predznak pa služi kot indikator, ki nam pove, ali je stanje prevladujoče natezno ali tlačno.



**Slika 1:** Vrednosti troosnosti napetostnega stanja  $\eta$  pri različnih obremenitvenih stanjih.

Gostoto deformacijske energije reformuliramo v naslednjo obliko

$$C = \psi_t(\eta) C_t + \psi_c(\eta) C_c, \quad (5)$$

kjer sta  $C_t$  in  $C_c$  deformacijski energiji,  $\psi_t(\eta)$  in  $\psi_c(\eta)$  pa utežni funkciji. Deformacijska energija  $C_t$  opisuje materialni odziv pri nateznih napetostnih stanjih,  $C_c$  pa pri tlačnih napetostnih stanjih. Zapišemo ju na enak način kot (2) pri čemer se indeks  $\alpha$  nanaša na natezno ( $t$ ) oz. tlačno ( $c$ ) napetostno stanje.

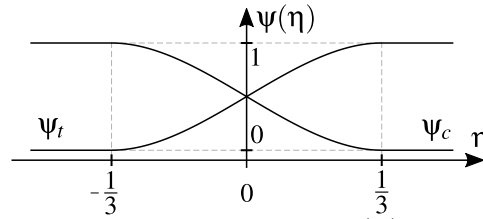
$$C_\alpha = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{S}_\alpha : \boldsymbol{\sigma} + \frac{\zeta_\alpha^{n_\alpha - 1}}{n_\alpha + 1} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{N}_\alpha : \boldsymbol{\sigma}, \quad \alpha \in \{t, c\}. \quad (6)$$

Utežni funkciji  $\psi_t(\eta)$  in  $\psi_c(\eta)$  poskrbita, da ima deformacijska energija  $C_t$  vpliv le pri nateznih napetostnih stanjih ( $\eta \geq 1/3$ ), ter da ima energija  $C_c$  vpliv le pri tlačnih napetostnih stanjih ( $\eta \leq -1/3$ ). V prehodnem območju med enosnim nateznim in enosnim tlačnim stanju ( $-1/3 < \eta < 1/3$ ) pa zagotovita zvezen prehod po mešalnem zakonu. Definirani sta kot

$$\psi_t(\eta) = \begin{cases} 0; & \eta < -1/3 \\ (3\eta + 1)^2(2 - 3\eta)/4; & -1/3 \leq \eta \leq 1/3 \\ 1; & \eta > 1/3 \end{cases} \quad (7)$$

$$\psi_c(\eta) = \begin{cases} 1; & \eta < -1/3 \\ (3\eta - 1)^2(2 + 3\eta)/4; & -1/3 \leq \eta \leq 1/3 \\ 0; & \eta > 1/3 \end{cases}$$

Na sliki 2 je prikazan še potek utežnih funkcij.



Slika 2: Potek utežnih funkcij  $\psi_t(\eta)$  ter  $\psi_c(\eta)$ .

Gostoto deformacijske energije (5) še odvajamo po napetostnem tenzorju in tako dobimo končno konstitutivno relacijo

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \left( \frac{d\psi_t(\eta)}{d\eta} C_t + \frac{d\psi_c(\eta)}{d\eta} C_c \right) \frac{\partial \eta}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + \psi_t(\eta) \frac{\partial C_t}{\partial \boldsymbol{\sigma}} + \psi_c(\eta) \frac{\partial C_c}{\partial \boldsymbol{\sigma}}. \quad (8)$$

V primeru, da so materialne lastnosti pri nateznem in tlačnem obremenjevanju enake ( $\mathbb{S}_t = \mathbb{S}_c$ ,  $\mathbb{N}_t = \mathbb{N}_c$  in  $n_t = n_c$ ) se konstitutivna zveza (8) poenostavi nazaj na obliko (3).

### 3 Postopek identifikacije parametrov

Lastnosti tega modela so zajete z štirimi prožnostnimi tenzorji  $\mathbb{S}_t$ ,  $\mathbb{S}_c$ ,  $\mathbb{N}_t$  in  $\mathbb{N}_c$ , ter dvema eksponentoma  $n_t$  in  $n_c$ . V primeru polne anizotropije ima vsak tenzor 21 neodvisnih parametrov, kar pomeni, da ima model 86 neodvisnih parametrov. Določitev vseh parametrov v tem primeru hitro postane neobvladljivo, zato bo v tem poglavju predstavljen koncept 4-stopenjske identifikacije parametrov.



Konstitutivni model (8) ima dve lastnosti, ki bistveno poenostavita postopek identifikacije. Prva lastnost modela je, da pri nateznih obremenitvah, ko velja  $\eta \geq 1/3$ , na materialni odziv vplivata le tenzorja  $\mathbb{S}_t$  in  $\mathbb{N}_t$  ter eksponent  $n_t$ . Obratno velja pri tlačnih obremenitvah, ko je  $\eta \leq -1/3$ , kjer na materialni odziv vplivajo le  $\mathbb{S}_c$ ,  $\mathbb{N}_c$  ter  $n_c$ . To nam omogoča, da sta ti dve skupini materialnih parametrov določeni popolnoma neodvisno iz nateznih ter tlačnih testov posebej.

Druga lastnost modela, ki dodatno poenostavi postopek identifikacije, pa omogoča separacijo določitve parametrov, ki vplivajo na linearen ter nelinearen del materialnega odziva. To je izvedljivo, ker je začetni naklon materialnega odziva odvisen le od linearnega prožnostnega tenzorja  $\mathbb{S}$ , kar lahko pokažemo z odvodom konstitutivne zveze (3) po napetostnem tenzorju  $\boldsymbol{\sigma}$ :

$$\left. \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \right|_{\boldsymbol{\sigma}=\mathbf{0}} = \mathbb{S} \quad (9)$$

Linearni prožnostni tenzor  $\mathbb{S}$  lahko torej neodvisno določimo na podlagi tangentnega odziva v začetku obremenjevanja. Ko je ta poznan, iz celotnega odziva naknadno določimo še nelinearni prožnostni tenzor  $\mathbb{N}$  ter eksponent  $n$ .

#### Primer za ortotropen material v eni ravnini

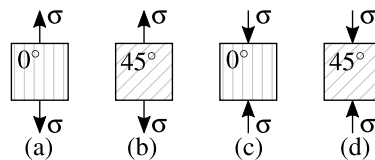
Za primer si pogledjmo postopek identifikacije parametrov za ortotropen material v eni ravnini. V tem primeru linearni prožnostni tenzor v Voight-ovi notaciji zapišemo kot

$$[\mathbb{S}_\alpha] = \begin{bmatrix} 1/E_1^{(\alpha)} & -\nu_{12}^{(\alpha)}/E_1^{(\alpha)} & 0 \\ -\nu_{12}^{(\alpha)}/E_1^{(\alpha)} & 1/E_2^{(\alpha)} & 0 \\ 0 & 0 & 1/G_{12}^{(\alpha)} \end{bmatrix}, \quad \alpha \in \{t, c\}, \quad (10)$$

kjer sta  $E_1^{(\alpha)}$  in  $E_2^{(\alpha)}$  modula elastičnosti,  $G_{12}^{(\alpha)}$  strižni modul in  $\nu_{12}^{(\alpha)}$  Poissonov količnik. Na podoben način lahko zapišemo tudi nelinearen prožnostni tenzor:

$$[\mathbb{N}_\alpha] = \begin{bmatrix} 1/A_{11}^{(\alpha)} & 1/A_{12}^{(\alpha)} & 0 \\ 1/A_{12}^{(\alpha)} & 1/A_{22}^{(\alpha)} & 0 \\ 0 & 0 & 1/B_{12}^{(\alpha)} \end{bmatrix}, \quad \alpha \in \{t, c\}, \quad (11)$$

kjer so  $A_{11}^{(\alpha)}$ ,  $A_{22}^{(\alpha)}$ ,  $A_{12}^{(\alpha)}$  ter  $B_{12}^{(\alpha)}$  nelinearni togostni moduli. Še z upoštevanjem eksponentov  $n_t$  in  $n_c$  je skupno število konstitutivnih parametrov v tem primeru 18. Parametre lahko v tem primeru določimo z enoosnim nateznim ter tlačnim testom, ki jih izvedemo v dveh različnih smereh. Potrebni so torej štirje testi, prikazani na sliki 3, kjer pri vsakem merimo materialni odziv v vzdolžni ter prečni smeri. Skupaj torej imamo 8 krivulj.



Slika 3: Potrebni testi za določitev parametrov ortotropnega materiala.

Parametre določimo v naslednjih korakih:

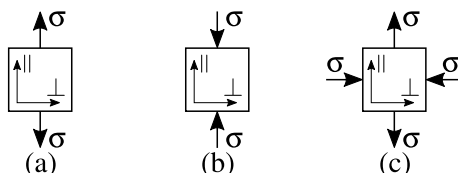
1. *Linearne lastnosti odziva v nategu:* Določimo začetne naklone krivulj pridobljenih iz nateznih testov 3(a) in 3(b). Iz dobljenih naklonov lahko preko linearnega sistema enačb enolično določimo parametre  $E_1^{(t)}$ ,  $E_2^{(t)}$ ,  $\nu_{12}^{(t)}$  ter  $G_{12}^{(t)}$ .

2. *Nelinearne lastnosti odziva v nategu:* Z upoštevanje celotnih materialnih odzivov iz nateznih testov 3(a) in 3(b) preko optimizacijskega postopka hkrati določimo parametre  $A_{11}^{(t)}$ ,  $A_{22}^{(t)}$ ,  $A_{12}^{(t)}$ ,  $B_{12}^{(t)}$  ter  $n_t$ .
3. *Linearne lastnosti odziva v tlaku:* Ponovimo postopek iz 1. koraka, kjer na podlagi tlačnih testov 3(c) in 3(d) določimo parametre  $E_1^{(c)}$ ,  $E_2^{(c)}$ ,  $\nu_{12}^{(c)}$  ter  $G_{12}^{(c)}$ .
4. *Nelinearne lastnosti odziva v tlaku:* Ponovimo postopek iz 2. koraka, kjer na podlagi tlačnih testov 3(c) in 3(d) določimo parametre  $A_{11}^{(c)}$ ,  $A_{22}^{(c)}$ ,  $A_{12}^{(c)}$ ,  $B_{12}^{(c)}$  ter  $n_c$ .

Predlagan nabor mehanskih testov seveda ni edina možnost. Uporabili bi lahko tudi dvoosno natezne ter tlačne teste ali katerokoli drugo kombinacijo, iz katere lahko pridobimo dovolj informacij, vendar pa je omenjena kombinacija izvedbeno najenostavnejša.

#### 4 Verifikacija modela

V tem poglavju bo konstitutivni model verificiran na eksperimentalno pridobljenih materialnih odzivih. Za kalibracijo so uporabljeni eksperimentalni podatki iz [12], kjer so bili za polimerni kompozit steklenimi vlakni izvedeni natezni, tlačni ter strižni preizkusi. Za vsak mehanski test so bili preizkušanci obremenjeni v smereh  $0^\circ$ ,  $22.5^\circ$  ter  $45^\circ$  glede na orientacijo vlaken. Skupaj je torej bilo izvedenih 9 testov, kjer je bila pri vsakem merjena vzdolžna in prečna deformacija. Slika 4 shematsko prikazuje izvedene mehanske teste, na katerih so označene smeri vzdolžne ( $\parallel$ ) in prečne deformacije ( $\perp$ ).



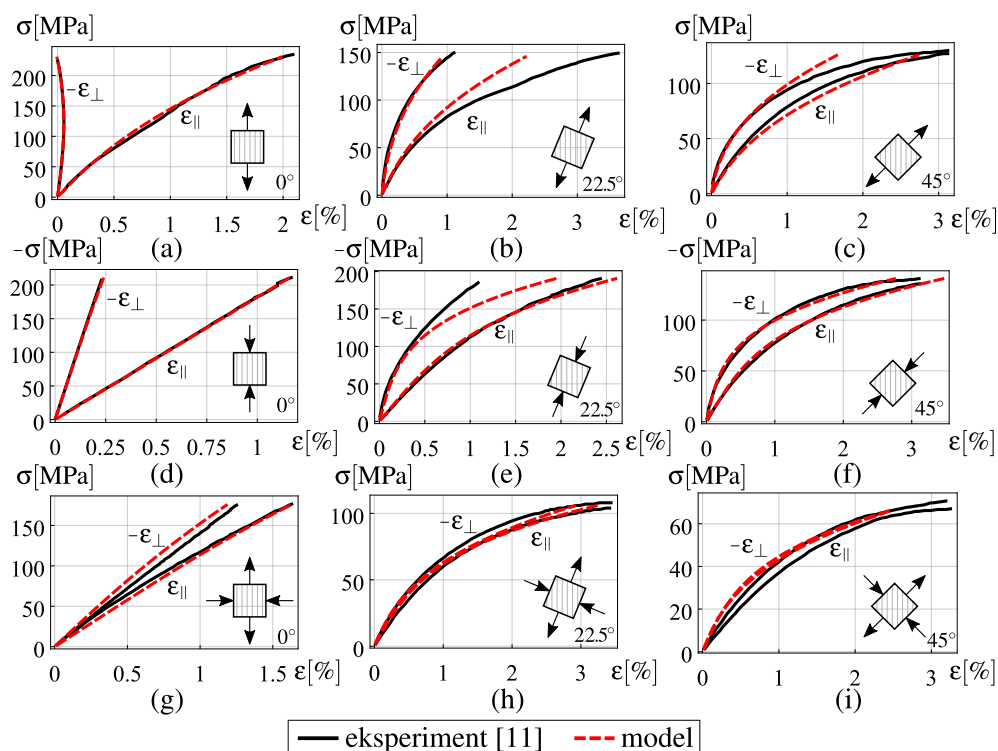
**Slika 4:** Natezni (a), tlačni (b) ter strižni (c) mehanski preizkus.

Za kalibracijo modela so bili uporabljeni odzivi pri nateznih ter tlačnih testih izvedenih v smereh  $0^\circ$  ter  $45^\circ$ , prikazani na sliki 5 (a),(c),(d),(f). Materialni odzivi nateznih in tlačnih testov v smeri  $22.5^\circ$  ter strižnih testov pa so bili uporabljeni za verifikacijo predikcijskih sposobnosti modela. Vrednosti identificiranih parametrov so podani v tabeli 1.

**Tabela 1:** Vrednosti identificiranih parametrov.

$\alpha$	$E_1^{(\alpha)}$ [GPa]	$E_2^{(\alpha)}$ [GPa]	$G_{12}^{(\alpha)}$ [GPa]	$\nu_{12}^{(\alpha)}$ [ / ]	$A_{11}^{(\alpha)}$ [GPa]	$A_{22}^{(\alpha)}$ [GPa]	$A_{12}^{(\alpha)}$ [GPa]	$B_{12}^{(\alpha)}$ [GPa]	$n_\alpha$ [ / ]
$t$	19.8	14.2	4.86	0.152	1.69	174	7.46	0.223	2.43
$c$	18.2	13.1	4.15	0.199	$\infty$	1.77	-2.27	0.130	3.57

Neskončna vrednost nelinearnega togostnega modula  $A_{11}^{(c)}$  v prožnostnem tenzorju (11) rezultira kot ničelni člen. Slika 5 prikazuje primerjavo med eksperimentalnimi materialnimi odzivi ter odzivi predstavljenega konstitutivnega modela.



**Slika 5:** Primerjava med eksperimentalnimi odzivi ter odzivi konstitutivnega modela.

Najprej pogledjmo odzive (a), (c), (d) in (f), na podlagi katerih je model kalibriran. Opazimo lahko odlično ujemanje z eksperimentalnim odzivom, malenkost slabše pa je v primeru (c), kjer je pri prečni deformaciji pri vrednostih večjih od 1% opazna deviacija. Naj še enkrat poudarimo, da so na podlagi teh odzivov vsi ostali odzivi nato dobljeni s pomočjo modela. Tudi pri slednjih je ujemanje z eksperimentalnimi podatki zelo dobro. Nekoliko večje odstopanje lahko opazimo le pri vzdolžni deformaciji (b) ter prečni deformaciji (e) pri vrednostih večjih od 0.5%.

## 5 Zaključki

V prispevku je predstavljen nov fenomenološki konstitutivni model za opis polimernih kompozitov ojačanih z vlakni. Osnova na nelinearni Ramberg-Osgoodovi zvezi ter odvisnost od napetostne troosnosti modelu omogočata opis fenomenov, kot so nelinearnost, anizotropija ter asimetrija med natezno in tlačno obremenjenimi stanji. V kolikor material ne odraža natezno-tlačne asimetrije in se odziva linearno, se konstitutivni model poenostavi na obliko klasične linearne anizotropije. Dobra lastnost modela je ločen vpliv parametrov na posamezne fizikalne fenomene, kar omogoča bolj enostaven postopek identifikacije njihovih vrednosti v štirih ločenih skupinah. Pokazane so dobre napovedne lastnosti modela, saj lahko na podlagi kalibracije iz enostavnih testov dobro napove materialni odziv tudi v drugih obremenitvenih stanjih ter materialnih orientacijah. Fenomenološka narava predstavljenega modela omogoča njegovo uporabo tudi pri drugih materialih, ki izkazujejo podobne lastnosti kot polimerni kompoziti, kot so na primer kamnine in razni porozni materiali.

## Literatura

- [1] S. A. Ambartsumian and A. A. Khachatrian. Basic equations in the theory of elasticity for materials with different resistance to tension and compression. *Inzhenernyi zhurnal - Mekhanika tverdogo tela*, pages 44–53, 1966.
- [2] C. W. Bert. Models for fibrous composites with different properties in tension and compression. 1977.
- [3] Z. Du, G. Zhang, T. Guo, S. Tang, and X. Guo. Tension-compression asymmetry at finite strains: A theoretical model and exact solutions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 143:104084, 2020.
- [4] Y. He and A. Makeev. Nonlinear shear behavior and interlaminar shear strength of unidirectional polymer matrix composites: A numerical study. *International Journal of Solids and Structures*, 51(6):1263–1273, 2014.
- [5] R. M. Jones. Stress-strain relations for materials with different moduli in tension and compression. *Aiaa Journal*, 15(1):16–23, 1977.
- [6] M. Latorre and F. J. Montáns. Bi-modulus materials consistent with a stored energy function: Theory and numerical implementation. *Computers & Structures*, 229:106176, 2020.
- [7] E. V. Lomakin and B. N. Fedulov. Nonlinear anisotropic elasticity for laminate composites. *Meccanica*, 50(6):1527–1535, 2015.
- [8] E. V. Lomakin and Y. N. Rabotnov. A theory of elasticity for an isotropic body with different moduli in tension and compression. *Mechanics of Solids*, 13(6):25–30, 1978.
- [9] E. V. Lomakin and O. P. Shchendrigina. Stresses and strains in a disk of physically nonlinear material with stress state dependent properties. *Mechanics of Solids*, 55(4):475–481, 2020.
- [10] B. P. Patel, K. Khan, and Y. Nath. A new constitutive model for bimodular laminated structures: Application to free vibrations of conical/cylindrical panels. *Composite Structures*, 110:183–191, 2014.
- [11] W. Ramberg and W. R. Osgood. Description of stress-strain curves by three parameters. Technical Report NACA-TN-902, 1943.
- [12] E. W. Smith and K. J. Pascoe. The role of shear deformation in the fatigue failure of a glass fibre-reinforced composite. *Composites*, 8(4):237–243, 1977.
- [13] K. Vijayakumar and K. P. Rao. Stress-strain relations for composites with different stiffnesses in tension and compression. *Computational mechanics*, 2(3):167–175, 1987.
- [14] L. Zhang, H. W. Zhang, J. Wu, and B. Yan. A stabilized complementarity formulation for nonlinear analysis of 3D bimodular materials. *Acta Mechanica Sinica*, 32(3):481–490, 2016.



***Posreden in neposreden vpliv omrežja iz enostenskih-  
ogljikovih nanocevk v polietilenu visoke gostote na časovno  
odvisno mehansko vedenje***

*Alen Oseli<sup>1</sup> in Lidija Slemenik Perše<sup>1</sup>*

***Direct and indirect effects of single-walled-carbon nanotubes  
network formation in high-density polyethylene on time-  
dependent mechanical behavior***

**Povzetek.** V okviru raziskave smo obravnavali vpliv omrežja eno-stenskih ogljikovih nano-cevk (SWCNT) v polietilenu visoke gostote (HDPE) na časovno odvisne mehanske lastnosti nanokompozitov, kjer smo se osredotočili na mehansko ojačitev ter časovno odvisno vedenje tovrstnih materialov. Rezultati raziskave so pokazali, da SWCNT-ji pod  $\phi_{v,krit}$  (geometrijskim prepletom) oslabijo material, kar opazimo kot znižanje  $1/J_{rel}$ , ki je posredno povezano z zmanjšano  $\chi_c$  (urejenosti makromolekul v matričnem materialu). Nad  $\phi_{v,krit}$  SWCNT-ji vzpostavijo naključno povezano omrežje, ki močno ojača material (prenos zunanje obremenitve), kar opazimo z dvigom  $1/J_{rel}$ . Iz raziskave je razvidno, da ima lahko nanopolnilo tako pozitivne, kot tudi negativne posledice na mehansko vedenje polimernih nanokompozitov, ki zavisi od interakcij med nanopolnilom (nastankom omrežja), ter interakcij med nanopolnilom in makromolekulami matričnega materiala (zmanjšanje urejenosti makromolekul).

**Abstract.** Within the scope of the research, we evaluated the effect of single-walled carbon nano-tubes (SWCNT) network formation in high-density polyethylene (HDPE) on time-dependent mechanical properties, where we focused on mechanical reinforcement and time-dependent behavior of such materials. The results showed that SWCNTs below  $\phi_{v,crit}$  (geometrical entanglement) weaken the material, which was observed with decrease of the  $1/J_{rel}$ , and is indirectly related to the decrease of  $\chi_c$  (ordering of macromolecules in the matrix material). Above  $\phi_{v,crit}$ , however, SWCNTs establish a randomly connected web that strongly reinforces the material (transfer of external load), which is observed by increase of the  $1/J_{rel}$ . Thus, the research shows that nanofiller can also have negative effect on the mechanical behavior of polymer-based nanocomposites, which depends on the interactions among nanofiller (network formation), as well as the interactions between nanofiller and macromolecules within matrix material (decrease in ordering of macromolecules).

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

## 1 Uvod

Paličasta oblika, izjemna trdnost in učinkoviti prenos elektronov so le nekatere izmed lastnosti, ki ogljikove nanocevice, *ang. Carbon NanoTubes* - v nadaljevanju CNT, postavljajo med superiorna funkcionalna polnila v tako imenovanih polimernih nanokompozitih [2]. Zaradi svoje anizotropne geometrijske konfiguracije (paličaste oblike) lahko vzpostavijo naključno povezano omrežje, ki močno spremeni fizikalne lastnosti ter posledično funkcionalnost materiala. Tako lahko omrežje v luči inherentnih lastnosti CNT-jev služi kot mehanska ojačitev ali prevodna pot, kar lahko uporabimo v številnih obstoječih oziroma prihodnjih tehnologijah na različnih področjih, od zdravja in medicine, elektronike in fotonike, pa vse do energije in kompozitov.

Eno od pomembnih področjih, na katerega je raziskava osredotočena, so mehanski odzivi takoimenovanih CNT polimernih nanokompozitov, saj mehansko vedenje pogojuje tudi električne in ostale odzive, vezano predvsem na področje v senzorike, fleksibilnih naprav itd. [9]. Izkaže se, da lahko dodajanje CNT-jev v matrični material neposredno ali posredno vpliva na mehanske odzive (mehansko ojačitev, časovno odvisnost itd.). V primeru zunanje obremenitve CNT-ji skrbijo za neposreden prenos sile iz matričnega materiala na nanopolnilo, kar mehansko ojača material (izraženo preko modulov, relativnih modulov itd.) [6], hkrati pa ovirajo razpletanje, torej upočasnijo časovno odvisne oziroma viskoelastične procese (zaznane pri procesu lezenja, relaksacije itd.) [4]. Seveda pa CNT-ji lahko neposredno vplivajo na mehanske lastnosti. V tem primeru CNT-ji spremenijo morfološko sliko matričnega materiala, vplivajo na mobilnost in urejenost makromolekul, kar tudi vpliva na mehansko vedenje. Omenjene kompleksne povezave medsebojnih odvisnosti zaenkrat še niso raziskane.

V okviru raziskave smo tako obravnavali vpliv omrežja iz eno-stenskih ogljikovih nanoccev (SWCNT) v polietilenu visoke gostote (HDPE) na časovno odvisne mehanske lastnosti nanokompozitov, kjer smo se osredotočili na mehansko ojačitev ter neposredne (nastanek omrežja) in posredne vplive (zmanjšanje urejenosti makromolekul zaradi omrežja).

## 2 Eksperimentalni del

### 2.1 Matrični material in nanopolnilo

V okviru raziskave smo za pripravo nanokompozitov uporabili komercialno dostopen polietilen visoke gostote, *ang. High-Density PolyEthylene* - v nadaljevanju HDPE, (HDI2061 NATURAL, Braskem Idesa, Mehika) z gostoto  $\rho_{HDPE} = 0,955 \text{ g/cm}^3$ . Kot nanopolnilo smo uporabili enostenske ogljikove nanocevice, *ang. Single-Walled Carbon NanoTubes* - v nadaljevanju SWCNT, v obliki zmesi (Tuball matrix 801, OCSiAl, Luksemburg), ki je vsebovala 10 mas. % SWCNT-jev z gostoto  $\rho_{SWCNT} = 1,3 \text{ g/cm}^3$ , in 90 mas. % polietilena nizke molekulske mase PENMM z gostoto  $\rho_{PENMM} = 0,941 \text{ g/cm}^3$  [3]. Po specifikacijah proizvajalca je bil srednji premer SWCNT-nanopolnila  $\langle d \rangle_{SWCNT} = 1,6 \text{ nm}$ , srednja dolžina  $\langle l \rangle_{SWCNT} > 5 \mu\text{m}$  ter razmerje med njima  $\langle \alpha \rangle_{SWCNT} = \langle l \rangle_{SWCNT} / \langle d \rangle_{SWCNT} > 3125$ .

### 2.2 Priprava nanokompozitov

Nanokompozite smo pripravili v dveh fazah. V prvi fazi smo z dvopolžnim ekstruderjem Haake MiniLab (Thermoscientific, ZDA) pripravili različne mešanice iz polimerne matrice in SWCNT-zmesi. Pripravljene mešanice smo nato v drugi fazi uporabili za izdelavo končnih

vzorcev, ki so bili izdelani z uporabo injekcijskega brizgalnika Haake MiniJet (Thermoscientific, ZDA).

V prvi fazi smo pripravili različne mešanice iz matričnega materiala HDPE in Tuball 801 zmesi, ki so vsebovale od  $\Phi_m = 0,00\%$  do  $\Phi_m = 5,00\%$  masnega deleža SWCNT-jev. Maksimalno maso  $m_{cel} = 6$  g mešanice smo vstavili v ekstruder ter mešali  $t_{meš} = 10$  min pri temperaturi  $T_{meš} = 220$  °C. Med doziranjem, ki je trajalo  $t_{1,meš} = 1$  min, smo hitrost polžev nastavili na  $n_{1,meš} = 100$  min<sup>-1</sup>. Kasneje, pri samem mešanju, ki je trajalo  $t_{2,meš} = 9$  min, pa smo hitrost povišali na  $n_{2,meš} = 200$  min<sup>-1</sup>. Glede na navodila proizvajalca smo pri mešanju uporabili visoko temperaturo, ki je pri predelavi zagotavljala boljšo disperzijo nanopolnila v matričnem materialu, ter visoko hitrost mešanja, zagotavlja boljše razbijanje (trganje) oziroma erozijo primarnih aglomeratov. Izkazalo se je, da pri izbrani hitrosti število nerazbitih primarnih aglomeratov pade za  $\leq 2\%$  površinskega razmerja (določeno s pomočjo optične mikroskopije), kar predstavlja dober raztros tovrstnega nanopolnila v materialu [7].

V drugi fazi smo homogenizirano talino transportirali v napravo za injekcijsko brizganje. Pri brizganju je bil grelnik nastavljen na temperaturo  $T_{inj} = 180$  °C, orodje pa na  $T_{orod} = 45$  °C. Talino smo  $t_{inj} = 10$  s brizgali v orodje pri tlaku  $p_{inj} = 50$  MPa, nato pa smo za dodatnih  $t_{nak} = 10$  s material popuščali pri tlaku  $p_{nak} = 15$  MPa. Pri procesu brizganja smo temperaturo zmanjšali s  $T_{meš}$  na  $T_{inj}$  ter s tem onemogočili reagregacijo oziroma formacijo sekundarnih aglomeratov, tj. grozdov, med cikli brizganja [7].

V sklopu raziskave smo izdelali vzorce pravokotnega prereza, dolžine  $l = 60$  mm, širine  $w = 10$  mm in debeline  $h = 1$  mm. Da bi zagotovili verodostojnost podatkov oziroma preverili vpliv izdelave vzorcev, smo za vsak delež polnila pripravili maksimalno 5 vzorcev, na katerih so bile izdelane nadaljnje meritve oziroma analize.

## 2.3 Eksperimentalne metode

### 2.3.1 Termična analiza

Eksperimentalni sklop termične analize je bil namenjen študiju vpliva SWCNT-omrežja na morfološke spremembe in urejenost molekul v matričnem materialu, ki posredno vplivajo na fizikalne lastnosti nanokompozita v trdnem stanju. Omenjene spremembe v urejenosti opazujemo s pomočjo temperature faznih prehodov (kristalizacije  $T_c$  in taljenja  $T_m$ ), entalpij faznih prehodov  $\Delta H$  (kristalizacije  $\Delta H_c$  in taljenja  $\Delta H_m$ ), ter deleža kristaliničnosti  $\chi_c$ .

Za določitev zgoraj omenjenih vplivov smo v sklopu termične analize uporabili diferenčni dinamičen kalorimeter DSC-1 (Mettler Toledo, ZDA). Vse meritve so bile izvedene po standardu ISO 11357 s hitrostjo segrevanja in ohlajanja  $\dot{T}_{seg/ohl} = 10$  °C/min v temperaturnem območju od  $T_{min} = 0$  °C do  $T_{maks} = 200$  °C. Meritve so potekale v dušikovi atmosferi z namenom preprečevanja oksidacije. Rezultati termičnih lastnosti predstavljajo povprečje treh meritev, medtem ko napaka predstavlja maksimalno odstopanje od povprečne vrednosti.

### 2.3.2 Časovno odvisni mehanski testi

Eksperimentalni sklop časovno odvisnih mehanskih testov je bil namenjen tako študiju vpliva SWCNT-omrežja na mehansko ojačitev, kot tudi študiju vpliva SWCNT-omrežja na reorganizacijo/razpletanje molekul v trdnem stanju (vezano na procese lezenja). Oba vpliva

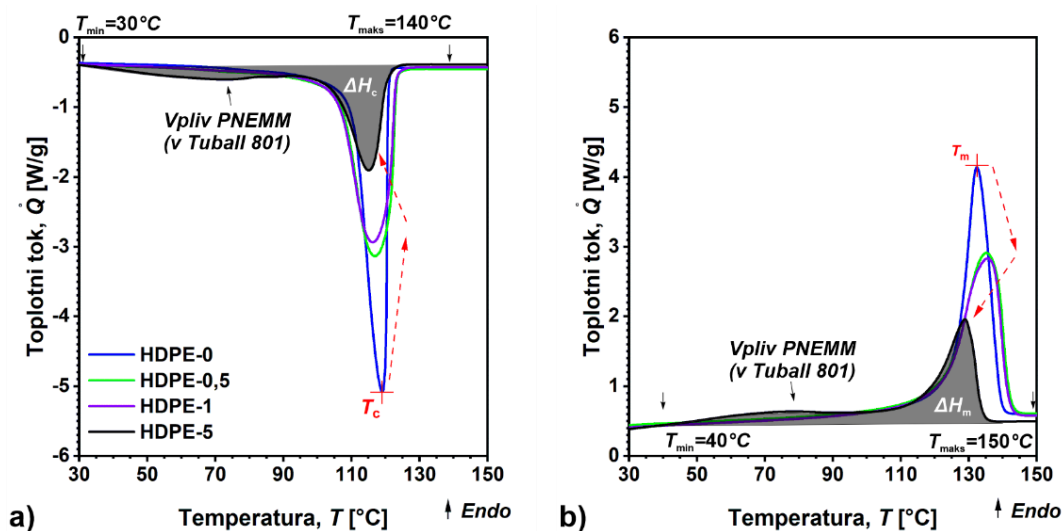
lahko opazujemo preko časovno odvisnih mehanskih lastnosti, tj. z materialnimi funkcijami strižne voljnosti  $J(t)$ .

Časovno odvisne mehanske lastnosti nanokompozitov smo določili na modularnem rotacijskem reometru Haake MARS II (ThermoScientific, ZDA). Pri tem je treba poudariti, da smo lastnosti določili v strigu, ki je eden od fundamentalnih načinov obremenjevanja. Vzorec je bil obremenjen s konstantno strižno napetostjo v linearnem območju  $\tau_0 = 0,01$  MPa (predhodno določeno z oscilacijskimi amplitudnimi testi). Za popis vedenja nanokompozitov v daljšem časovnem obdobju smo uporabili princip časovno-temperaturne superpozicije, pri čemer smo meritve lezenja opravili pri 9 različnih temperaturah od  $T_{\min} = 20$  °C do  $T_{\max} = 100$  °C s korakom  $\Delta T = 10$  °C. Pred izvedbo meritev smo vzorce predhodno 3 ure temperirali v laboratorijski temperaturni komori (Kambič, SP105C, Slovenija) pri temperaturi  $T_{\text{temp}} = 100$  °C ter s tem v veliki meri izbrisali termomehansko zgodovino vzorcev. Rezultati časovno odvisnih mehanskih testov tako predstavljajo povprečje treh meritev, medtem ko napaka predstavlja maksimalno odstopanje od povprečne vrednosti.

### 3 Rezultati in diskusija

#### 3.1 Vpliv SWCNT-omrežja na morfološko sliko nanokompozitov

Rezultati termične analize predstavljajo termograme, tj. toplotni tok v odvisnosti od temperature  $\dot{q}(T)$ , HDPE-nanokompozitov (slika 1). Zaradi jasnosti so na sliki prikazani le termogrami za izbrane nanokompozite, tj. HDPE-0; 0,5; 1 in 5, razdeljeni pa so na ohlajanje (slika 2a) in drugo segrevanje (slika 2b).



**Slika 1:** Termogrami a) ohlajanja (vezano na kristalizacijo) in b) drugega segrevanja (vezano na taljenje) HDPE-nanokompozitov.

Iz rezultatov se vidi, da dodajanje SWCNT-jev moti kinetiko kristalizacije in taljenja v matričnem materialu, kar je posledica bodisi prisotnosti nanopolnila, ki deluje kot nukleacijsko sredstvo, bodisi vzpostavljenega omrežja, ki omejuje rast kristalov, kar je moč opaziti s premikom temperature faznih prehodov, tj.  $T_c$  in  $T_m$  (slika 2a). Iz vrednosti  $T_c$  in  $T_m$  in opazimo

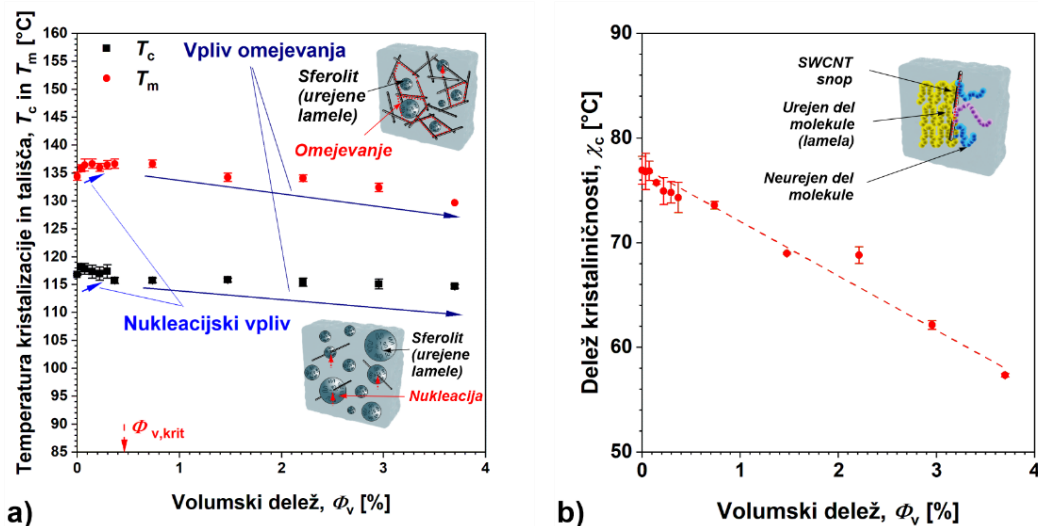


“tekmovanje” med nukleacijskimi (povečanje  $\Delta T_{c,nuk}$  in  $\Delta T_{m,nuk} = +1\text{ }^\circ\text{C}$ ) vplivi pri nizkih koncentracijah CNT in omejevalnimi vplivi pri višjih koncentracijah CNT (zmanjšanje  $\Delta T_{c,om}$  in  $\Delta T_{m,om} = -4\text{ }^\circ\text{C}$ ), kar je bilo že opredeljeno v literaturi za druge CNT-nanokompozite [1]. Na podlagi reoloških rezultatov o vzpostavitvi omrežja, objavljeni v [8], pa je sedaj jasno, da vpliv omejevanja prične dominirati v okolici nastanka omrežja  $\phi_{v,krit} = 0,4\%$  (geometrijski preplet SWCNT-jev).

Poleg omenjenega je preko entalpij faznih prehodov  $\Delta H$  možno opredeliti tudi morfologijo oziroma urejenost makromolekul v matričnem materialu ter posledičen vpliv SWCNT-omrežja na mehansko vedenje materiala v trdnem stanju. V tem primeru se za analizo pogosto uporabi parameter, imenovan delež kristaliničnosti  $\chi_c$ , ki je določen kot:

$$\chi_c = \frac{\Delta H_m}{\Delta H_m^0(1 - \phi_m)} \times 100, \quad (1)$$

kjer je  $\Delta H_m^0$  fuzijska entalpija (entalpija “maksimalno” kristaliziranega materiala), ki je bila za HDPE opredeljena kot  $\Delta H_{c,HDPE}^0 = 293,2\text{ J/g}$  [5]. Iz rezultatov se jasno vidi, da SWCNT-ji (in nastajajoče omrežje) močno zmanjšajo urejenost molekul, saj  $\chi_c$  pade iz 76% na 56%, torej za  $\Delta\chi_c = -20\%$  (slika 2b).

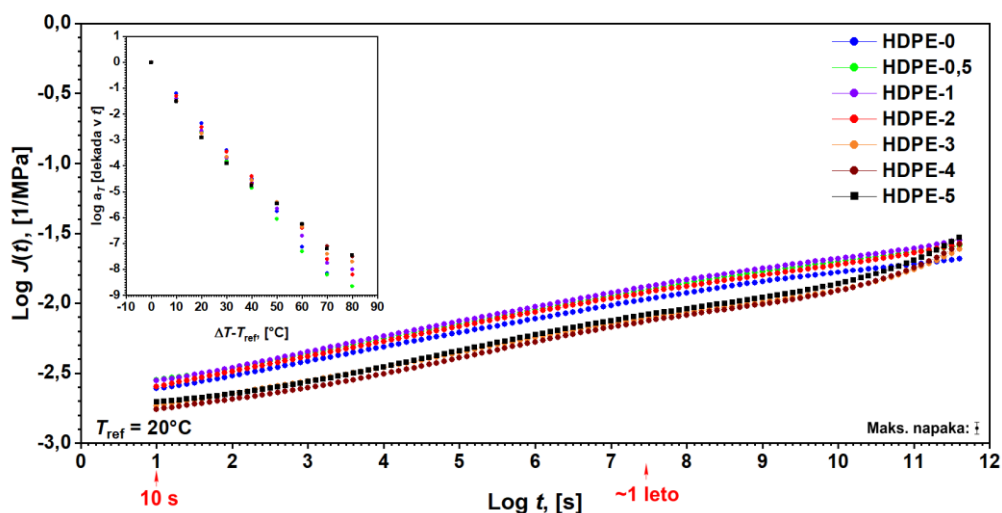


Slika 2: Vpliv SWCNT-jev na a) temperature faznih prehodov, ter b) delež kristaliničnosti HDPE nanokompozitov.

### 3.2 Vpliv SWCNT-omrežja na časovno odvisno mehansko vedenje nanokompozitov

Kot rezultat karakterizacije časovno odvisnega mehanskega vedenja dobimo izotermne segmente strižne voljnosti  $J(t)$ , ki predstavljajo normirano časovno odvisno deformacijo pri različnih temperaturah. Iz izmerjenih segmentov  $J(t)$  smo z uporabo časovno-temperaturnega superpozicijskega principa tTS sestavili sumarno krivuljo  $J(t)$  ali materialno funkcijo, ki popisuje mehansko vedenje materiala skozi daljše časovno obdobje pri referenčni temperaturi  $T_{ref} = 20\text{ }^\circ\text{C}$  (slika 3). Iz rezultatov lahko opazimo, da z dodajanjem volumskega deleža SWCNT-jev  $\phi_v$  spreminjamo tako mehansko ojačitev (ali oslabitev), ki je rezultat prenosa

obremenitve iz matričnega materiala na nanopolnilo, kot tudi časovno odvisno vedenje (upočasnjevanje/pospeševanje lezenja), ki je posledica razpletanja molekularne strukture. Očitno je, da so te spremembe močno pogojene ne samo z interakcijami med samimi SWCNT-ji (povezano z nastankom omrežja), temveč tudi interakcijami med nanopolnilom in makromolekulami v matričnem materialu (vezano na zmanjšanje  $\chi_c$ ).

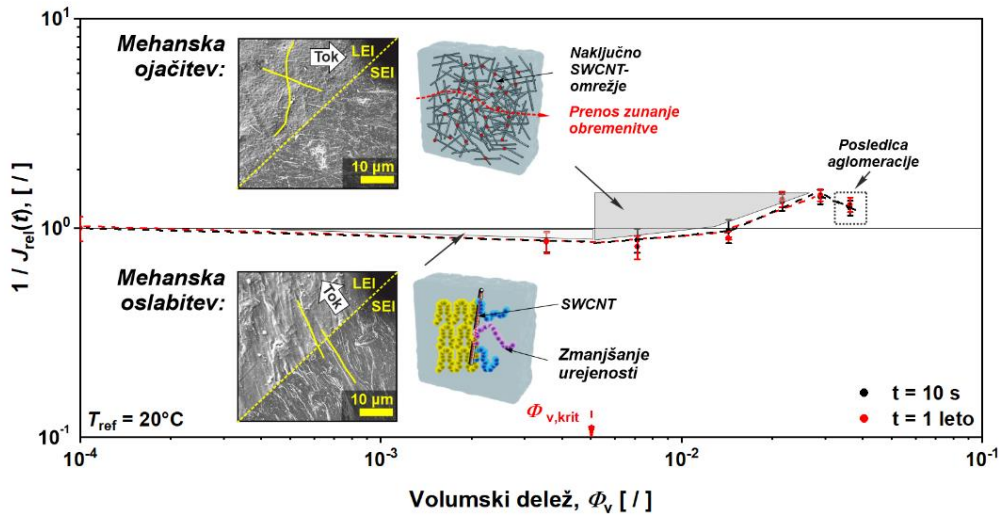


**Slika 3:** Sumarne krivulje strižne voljnosti (materialne funkcije) in pripadajoči premaknitveni faktorji, ki predstavljajo časovno odvisno mehansko vedenje HDPE nanokompozitov pri referenčni temperaturi  $T_{ref} = 20\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

V prvem koraku smo obravnavali vpliv volumskega deleža SWCNT  $\phi_v$  in nastanek SWCNT-omrežja na strižno mehansko ojačitev HDPE-nanokompozitov (slika 4). Pri tem smo strižno voljnost nanokompozitov  $J$  normalirali z voljnostjo matričnega materiala  $J_0$ , ter opredelili relativno strižno voljnost  $J_{rel}$  kot:

$$J_{rel} = \frac{J}{J_0}, \quad (2)$$

V nadaljevanju smo  $J_{rel}$  modificirali v obliko  $1/J_{rel}$ , ki jo sedaj, zaradi obratne sorazmernosti z modulom, lahko razumemo kot ojačitev. Rezultate smo prikazali v dvojni logaritemski skali, ki se uporabljajo za opazovanje sprememb trenda krivulj, s katerim lahko opredelimo nastanek omrežja pri kritični koncentraciji CNT kot  $\phi_{v,krit}$ . Poleg omenjenega smo  $1/J_{rel}$  obravnavali v dveh časovnih obdobjih, "v trenutku" ( $t = 10^1$  s) in po enem letu ( $t = 10^{7,5}$  s), ter opazili, da pri dobljenih rezultatih ni bilo bistvenih razlik. Iz rezultatov pod  $\phi_{v,krit}$  (pod geometrijskim prepletom SWCNT-jev) se opazi oslabitev, kar vidimo kot zmanjšanje  $1/J_{rel}$  in je posledica padca urejenosti makromolekul (zmanjšanje  $\chi_c$ ), (oslabitev za  $0,2 \times$  ali 20 %). Nad  $\phi_{v,krit}$ , pa SWCNT-ji vzpostavijo naključno omrežje, ki bistveno ojača material, kar je opazno z močnim porastom  $1/J_{rel}$  (ojačitev za  $1,5 \times$  ali 150 %), kot prikazuje tudi nekatera literatura na področju CNT-nanokompozitov [4]. Ne glede na to, se izkaže, da ima lahko nanopolnilo negativne posledice na mehanski odziv materiala, saj zmanjša urejenost, ki mehansko oslabi material (opazno pod  $\phi_{v,krit}$ ).



**Slika 4:** Obratna relativna strižna voljnost (izraža ojačitev) HDPE-nanokompozitov (za lažje razumevanje so podani tudi SEM mikrografi in shematski prikazi oslabitve in ojačitve).

#### 4 Zaključki

Ogljikove nanocevke (CNT-ji) predstavljajo revolucijo na področju nanokompozitov, saj v polimernem materialu vzpostavijo omrežje, ki opredeljuje funkcionalne lastnosti materiala (mehanska ojačitev, električna prevodnost itd.). Kakorkoli že, funkcionalnost takšnih materialov zavisi predvsem od vzpostavitve omrežja in njegove konfiguracije. V sklopu raziskave smo preverili vpliv SWCNT-omrežja na mehansko ojačitev HDPE-nanokompozitov in posledično časovno odvisno vedenje tovrstnih materialov. Izkaže se, da SWCNT-ji pod  $\phi_{v,krit}$  (geometrijskim prepletom), ne ojačajo materiala, kar opazimo z zmanjšanjem  $1/J_{rel}$ , in je posredno povezano z zmanjšanjem  $\chi_c$  (urejenosti makromolekul). Ne glede na to, pa nad  $\phi_{v,krit}$  SWCNT-ji vzpostavijo naključno povezano omrežje, ki močno ojača material (prenos zunanje obremenitve), kar opazimo z dvigom  $1/J_{rel}$ . Iz raziskave je razvidno, da ima lahko nanopolnilo tudi negativne posledice na mehansko vedenje polimernih nanokompozitov, kar ni v skladu s trenutnim razumevanjem tovrstnih materialov, vse pa seveda zavisi ne samo od interakcij nanopolnila in nastankom omrežja, temveč tudi od kompleksnih interakcij med nanopolnilom in makromolekulami matričnega materiala (vezano na njihovo urejenost).

#### Zahvala

Avtorji se zahvaljujejo dr. Alenki Vesel iz Inštituta Jožef Stefan za opravljene meritve elektronske mikroskopije ter Agenciji za raziskovalno dejavnost Republike Slovenija za finančno podporo (ARRS raziskovalni program P2-0264).

#### Literatura

- [1] V. J. Cruz-Delgado, C. A. Ávila-Orta, A. B. Espinoza-Martínez, J. M. Mata-Padilla, S. G. Solís-Rosales, A. F. Jalbout, F. J. Medellín-Rodríguez, B. S. Hsiao, *Carbon nanotube*

- surface-induced crystallization of polyethylene terephthalate (PET)*, Polymer. 55, 642--650, 2014.
- [2] A. C. Ferrari, et al., *Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems*, Nanoscale. 7, 4598--4810, 2015.
- [3] D. Fong, A. Adronov, *Recent developments in the selective dispersion of single-walled carbon nanotubes using conjugated polymers*, Chemical Science. 8, 7292--7305, 2017.
- [4] Y. Jia, K. Peng, X. Gong, Z. Zhang, *Creep and recovery of polypropylene/carbon nanotube composites*, International Journal of Plasticity. 27, 1239--1251, (2011).
- [5] S. L. Kodjie, L. Li, B. Li, W. Cai, C. Y. Li, M. Keating: *Morphology and crystallization behavior of HDPE/CNT nanocomposite*. Journal of Macromolecular Science – Physics. 45, 231--245, 2006.
- [6] A. Oseli, A. Vesel, M. Mozetič, E. Žagar, M. Huskić, L. Slemenik Perše, *Nano-mesh superstructure in single-walled carbon nanotube/polyethylene nanocomposites, and its impact on rheological, thermal and mechanical properties*, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. 136, 1--10, 2020.
- [7] A. Oseli, *Nastanek omrežja ogljikovih nanocevk v polietilenu ter njeov vpliv na fizikalne lastnosti nanokompozitov*, Doktorska disertacija. Ljubljana, 2021.
- [8] A. Oseli, A. Vesel, E. Žagar, L. S. Perše, *Mechanisms of Single-Walled Carbon Nanotube Network Formation and Its Configuration in Polymer-Based Nanocomposites*, Macromolecules. 54, 3334--3346, 2021.
- [9] J. C. Yang, J. Mun, S. Y. Kwon, S. Park, Z. Bao, S. Park: *Electronic Skin: Recent Progress and Future Prospects for Skin-Attachable Devices for Health Monitoring, Robotics, and Prosthetics*, Advanced Materials. 31, 1--50, 2019.



## *Zmanjševanje napetosti pri optimizaciji topologije na omejenih domenah*

*J. Predan<sup>1</sup>, B. Harl<sup>1</sup>, N. Gubeljak<sup>1</sup> in M. Kegl<sup>1</sup>*

### *Stress reduction in topology optimization on limited domains*

**Povzetek.** Optimizacija topologije, ki je osnovana na minimizaciji deformacijske energije, lahko generira oblike, katere izkazujejo koncentracije napetosti v regijah, kjer je porazdelitev materiala resno ovirana z omejeno optimizacijsko domeno. Ta prispevek predstavlja heuristični pristop za omilitev takšnih situacij. Temelji na vsiljenemu prerazporejanju materiala kot posledica zmanjšane nosilne sposobnosti visoko obremenjenih končnih elementov. V ta namen je uporabljen bilinearni elastični materialni model. Dobljeni rezultati nakazujejo, da predlagan pristop lahko izboljša napetostno stanje z zanemarljivo majhnim dodatnim računskim delom.

**Abstract.** Topology optimization based on strain energy minimization tends to deliver designs exhibiting stress concentrations in regions where material distribution is seriously hindered by a limited optimization domain. This paper presents a heuristic approach to mitigate this situation. It is based on enforcing material redistribution by reducing the load-carrying capability of highly stressed finite elements. For this purpose a bilinear elastic material model is engaged. The obtained results suggest that the proposed approach is capable of improving the stress state at negligible additional computational cost.

## **1 Uvod**

Zadnji dobri dve desetletji sta prinesli neverjeten razvoj metod za optimizacijo topologije (OT) konstrukcij. Pri tem je v središču problem optimizacije nosilnih delov, ki prenašajo mehanske obremenitve, čeravno smo lahko opazili tudi razvoj metod OT za drugačne naloge, na primer oblikovanje tokovnih kanalov za izboljšanje pretoka. Lep pregled, analizo in primerjavo najpomembnejših metod za optimizacijo topologije sta naredila Sigmund in Maute [3]. Avtorja ugotavljata, da je velika večina danes najbolj popularnih metod Eulerjevega tipa, in sicer v smislu, da se iskanje optimalne topologije vrši na fiksni (Eulerjevi) mreži končnih elementov. Med te najpopularnejše metode spadajo predvsem metode nivojske funkcije, metode tipa SIMP in evolucijske metode tipa BESO. Vse od naštetih metod, kakor tudi druge metode, se pojavljajo v številnih variacijah, tako da je natančna klasifikacija neke konkretne metode pogosto že skoraj nemogoča. Avtorji namreč v iskanju boljših rešitev pogosto za osnovo vzamejo eno metodo, ki jo nato obogatijo z izbranimi postopki druge metode ali pa s kakšnimi

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

hevrstičnimi dodatki. Sigmund in Maute [3] tudi ugotavljata, da pri vsej tej navidezni raznolikosti večina metod pravzaprav temelji na enakih ali vsaj zelo sorodnih temeljih. Kot primer lahko tukaj omenimo topološki in oblikovni gradient. Oba se v raznih metodah uporabljata v različnih variantah in kontekstih, vendar pa so, na primer Cea et al. [1] pokazali, da med tema dvema gradientoma obstaja zelo tesna povezava.

Kot je običajno, tudi tukaj vsaka izmed številnih metod za OT izkazuje neke svoje specifične prednosti in pomanjkljivosti. Posledično je torej izbor metode ali pa smer njenega razvoja kar precej odvisna od tega kakšne cilje in prioritete si postavimo. V okviru tega prispevka bomo govorili o možni izboljšavi ozko specializirane metode za OT, ki bi jo lahko v grobem opisali kot nek hibrid med metodo SIMP in metodo nivojske funkcije. Sama metoda ni predmet tega prispevka, zato bi tukaj navedli le najnujnejšo informacijo: bistvo metode je v tem, da izkorišča topološki gradient za to, da poganja razvoj nivojske funkcije na relativno enostaven hevrstični način. Takšna shema metodi omogoča izjemno računsko učinkovitost ter vključevanje raznih za prakso pomembnih dodatkov, kot so na primer topološki konfiguratorji [2]. Ohranjanje visoke računske učinkovitosti je ena od glavnih prioritete pri razvoju te metode.

## 2 Okvir dela in motivacija

Predmet obravnave je statično obremenjeno in linearno elastično telo  $B$  (obremenjen konstrukcijski del); statična obremenitev je neodvisna od pomikov. Šibko obliko enačbe, ki opisuje mehanski odziv takega sistema, lahko zapišemo kot

$$a(u, v; x) - b(v; x) = 0, \quad \forall v \in V \quad (1)$$

Pri tem je  $u$  polje pomikov,  $v$  je testno polje iz  $V$ , ki izpolnjuje ustrezne robne pogoje,  $x$  pa je generični parameter, ki vpliva na topologijo obravnavanega telesa. Funkcionala  $a$  in  $b$  sta definirana na  $B$  in linearna glede na  $u$  in  $v$ . V našem kontekstu je tukaj pomembno, da enačba (1) vzpostavlja implicitno odvisnost polja pomikov  $u$  od topološkega parametra  $x$ , torej v smislu  $u = u(x)$ .

Optimizacija topologije praviloma sloni na minimizaciji primerne funkcionala  $f$ , ki je definiran na  $B$  in v splošnem odvisen od  $u$  in  $x$ , oziroma

$$f = f(u, x) \quad (2)$$

Različne metode se minimizacije  $f$  lotevajo na različne načine, vendar pa praviloma vse zahtevajo izračun odvoda  $df/dx$ . V danih okoliščinah je ta izračun najboljše opraviti z uporabo metode pridružene spremenljivke. V ta namen definiramo pomožni funkcional

$$g = f(u, x) + a(u, w; x) - b(w; x) \quad (3)$$

za katerega očitno velja  $dg/dx = df/dx$ ,  $w$  pa je pridružena spremenljivka, ki mora biti element  $V$ , sicer je pa lahko poljubna. Odvajanje  $g$  po  $x$  nam da

$$\frac{dg}{dx} = \left( \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial a}{\partial u} \right) \frac{du}{dx} + \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial a}{\partial x} - \frac{\partial b}{\partial x} \quad (4)$$

od koder sledi, da se lahko zelo neprijetnemu računanju  $du/dx$  izognemo tako, da vrednost pridružene spremenljivke izračunamo iz pogoja

$$\frac{\partial a}{\partial u} = - \frac{\partial f}{\partial u} \quad (5)$$

Za sistem, ki je diskretiziran po metodi končnih elementov, lahko enačbo (5) zapišemo v matrični obliki kot

$$\mathbf{K}\mathbf{w} = \mathbf{P} \quad (6)$$

kjer je  $\mathbf{K}$  togostna matrika sistema,  $\mathbf{w}$  je neznan vektor vozliščnih vrednosti pridružene spremenljivke,  $\mathbf{P}$  pa je pridružen obremenitveni vektor.

Numerična implementacija OT zahteva precej računanja v vsakem optimizacijskem ciklu. Pri tem gre znotraj vsakega cikla daleč največ računskega časa za reševanje ravnovesne in pridružene enačbe

$$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{R}, \quad \mathbf{K}\mathbf{w} = \mathbf{P} \quad (7)$$

kjer  $\mathbf{u}$  označuje vektor neznanih vozliščnih pomikov,  $\mathbf{R}$  pa je vektor statične obremenitve. Ti dve enačbi je potrebno znotraj vsakega optimizacijskega cikla rešiti za vsak obremenitveni primer posebej.

V primeru konvencionalne OT je funkcional  $f$  enak ali sorazmeren deformacijski energiji telesa, na primer

$$f = a(u, u; x) \quad (8)$$

Zelo dobra novica pri tem je, da je v tem primeru vektor pridružene spremenljivke  $\mathbf{w}$  proporcionalen negativnemu vektorju pomikov  $\mathbf{u}$ , oziroma  $\mathbf{w} \propto (-\mathbf{u})$ . To pa pomeni, da sestavljanje in reševanje pridružene enačbe sploh ni potrebno. Na primer, če velja enačba (8), potem imamo  $\mathbf{w} = -2\mathbf{u}$ . S stališča računske učinkovitosti je to zelo ugodna situacija, ki pa se na žalost ne ohranja, če smo prisiljeni funkcional  $f$  definirati kako drugače. Na primer, pri OT z namenom minimizacije napetosti, se zadnja leta pogosto uporablja funkcional, ki je definiran kot napetostna p-norma, oziroma

$$f = \left( \int_B \sigma^p dB \right)^{\frac{1}{p}} \quad (9)$$

kjer je  $\sigma$  von Misesova napetost,  $p$  pa je parameter,  $p \geq 1$ . Ta funkcional je najbolj koristen v primerih, ko minimizacija deformacijske energije zaradi omejene domene telesa  $B$  ne more zagotoviti dovolj ugodne porazdelitve napetosti. Pri tem z izrazom *omejena domena* mislimo na takšno domeno, ki zaradi svoje oblike *resno ovira* razporejanje materiala pri minimizaciji deformacijske energije. Takšne situacije so v praksi na žalost kar pogoste, kar pomeni, da smo prisiljeni izbirati med dvema opcijama:

- A. Izberemo ustrezen funkcional  $f$ , ki bo zagotovil dovolj ugodno razporeditev napetosti. V tem primeru se ne moremo izogniti sestavljanju in reševanju ustrezne pridružene enačbe  $\mathbf{K}\mathbf{w} = \mathbf{P}$ .
- B. Ohranimo funkcional  $f = a(u, u; x)$  in poskusimo najti kakšen hevristični prijem, ki bi potencialno lahko zagotovil ustrežnejšo razporeditev napetosti. Tak postopek je seveda lahko koristen le v primeru, če je računsko visoko učinkovit in reševanje pridružene enačbe ni potrebno.

V tem delu obravnavamo eno od možnosti v okviru opcije B. Ciljamo namreč na učinkovito reševanje zelo velikih nalog OT. V takšnih okoliščinah pomeni namreč odprava potrebe po reševanju pridružene enačbe dragoceno prednost.

### 3 Izhodiščne predpostavke

Osnovna ideja za predlagan računsko ugoden hevristični način zmanjševanja napetosti temelji na numerični izkušnji pri topološki optimizaciji, in sicer, da izguba nosilnosti materiala v eni regiji za seboj potegne prerazporejanje materiala v celotni domeni. Takšen numerični poseg bo s seboj zagotovo prinesel poslabšanje funkcionala deformacijske energije (zmanjšanje togosti konstrukcije), vendar pa bi pri dobro zasnovanem postopku morda lahko iztržili bolj ugodno napetostno stanje. Na tej osnovi smo si zamislili scenarij, ki temelji na naslednjih predpostavkah:

- Material, ki je izpostavljen napetostim, ki so precej višje od povprečja (napetostne koncentracije), bo med optimizacijo delno izgubljal nosilnost, kar bomo simulirali z zmanjševanjem njegove togosti. Posledica bo prerazporejanje materiala, kar bo rezultiralo v bolj ugodnih napetostnih razmerah v optimiranem konstrukcijskem delu.
- Izračunavanje zmanjšane togosti materiala bomo numerično implementirali s pomočjo bilinearnega elastičnega modeliranja materiala. V tem kontekstu bo material znotraj ene MKE analize obravnavan linearno elastično, vendar pa se bodo njegove elastične lastnosti prilagajale med posameznimi optimizacijskimi cikli. S tem bomo ohranili računsko učinkovitost linearne MKE analize in izkoristili iterativno naravo optimizacijskega postopka.
- Specializirani končni elementi, ki jih uporabljamo za topološko optimizacijo, bodo opremljeni z eno dodatno lokalno spremenljivko stanja. Ta bo vezana na trenutno togost materiala končnega elementa.

Pričakujemo, da implementacija teh dodatkov v postopek optimizacije ne bo bistveno vplivala na računsko učinkovitost OT.

### 4 Numerična implementacija

Postopek izračunavanja zmanjšane togosti končnega elementa temelji na uporabi bilinearnega elastičnega (BLE) materialnega modela. Tak material ima napram izhodiščnemu linearno elastičnemu (LE) materialu dva dodatna parametra, in sicer:

- napetost  $\sigma_1$  pri kateri dejanski elastični modul  $E_0$  zamenjamo z drugim  $E_1$ , ter
- faktor  $\vartheta = E_1/E_0$ , ki določa velikost  $E_1$  v odvisnosti od  $E_0$ .

Ta dva parametra seveda ne odražata nobenih mehanskih lastnosti dejansko uporabljenega materiala, pač pa služita izključno kot pripomočka za doseganje želenih numeričnih učinkov. Njihove vrednosti je zato treba določiti računsko, glede na trenutno napetostno stanje v konstrukcijskem delu. Numerične izkušnje kažejo, da pri tem lahko uporabimo naslednji pristop:

1. Optimizacijo zaženemo z upoštevanjem LE materiala in naredimo toliko optimizacijskih ciklov, da dobimo vsaj približno končni rezultat.



2. Analiziramo napetostno stanje: izračunamo von Misesovo povprečno napetost  $\bar{\sigma}$  v prostih regijah optimiranega dela ter maksimalno vrednost napetosti  $\sigma_{max}$ . Parameter  $\sigma_1$  nato izberemo glede na ti dve napetosti, na primer,  $\sigma_1 = \bar{\sigma} + \frac{1}{2}(\sigma_{max} - \bar{\sigma})$ . Parameter  $\vartheta$  naj bo pri tem pozitiven ampak relativno majhen, na primer  $\vartheta = 0,01$ .
3. Materialni model prekopimo iz LE na BLE ter ponovno požnemo optimizer, da opravimo končno prerazporeditev materiala.
4. Materialni model prekopimo nazaj na LE ter preverimo rezultat, vključno z napetostnimi stanji. Če je potrebno, se vrnemo na korak 2.

Izvedba takšnega postopka seveda zahteva ustrezno prilagoditev uporabljenih končnih elementov. Pri slednjih je v naši osnovni izvedbi elastični modul v točki elementa podan preko polja

$$E = E(\xi, \eta, \zeta; x) \quad (10)$$

kjer so  $\xi$ ,  $\eta$ , in  $\zeta$  lokalne koordinate končnega elementa. Natančna oblika polja  $E$  je pri tem odvisna od izbire materialne funkcije in njene odvisnosti od trenutne topologije telesa.

Delno izgubo nosilnosti v takšnem elementu lahko simuliramo z zamenjavo originalnega polja  $E$  z nadomestnim

$$E^* = \kappa E \quad (11)$$

kjer parameter  $\kappa \in [0,1]$  lahko interpretiramo kot faktor togosti materiala. Ta faktor predstavlja lokalno spremenljivko stanja elementa; vrednost te spremenljivke moramo izračunavati in shranjevati za vsak element in za vsak obremenitveni primer posebej. Faktor togosti materiala uporabljamo izključno v kombinaciji z LE modelom.

Vrednost faktorja togosti  $\kappa$  lahko izračunavamo tokom optimizacijskega postopka na naslednji način:

1. Na začetku izberemo za vsak element startno vrednost  $\kappa = 1$ .
2. S trenutnimi vrednostmi faktorjev  $\kappa$  opravimo linearno analizo odziva.
3. Za vsak element iz njegovih deformacij izračunamo srednjo von Misesovo napetost  $\sigma_{LE}$  na osnovi LE modela (z upoštevanjem  $\kappa$ ) in srednjo von Misesovo napetost  $\sigma_{BLE}$  na osnovi BLE modela (brez upoštevanja  $\kappa$ ).
4. Za tiste elemente, pri katerih velja  $\sigma_{LE} > \sigma_{BLE}$ , izračunamo nove vrednosti faktorjev  $\kappa$ , tako da dobimo  $\sigma_{LE} = \sigma_{BLE}$ .
5. Za tiste elemente, pri katerih velja  $\sigma_{LE} < \sigma_{BLE}$  in  $\kappa < 1$ , izračunamo nove vrednosti faktorjev  $\kappa$ , tako da dobimo ali  $\sigma_{LE} = \sigma_{BLE}$  in  $\kappa < 1$  ali pa  $\kappa = 1$ .
6. Opravimo popravek topologije telesa.
7. Preverimo konvergenco optimizacijskega postopka in se po potrebi vrnemo na korak 2.

Tukaj opozorimo na dejstvo, da je treba v vsakem optimizacijskem ciklu vse korake od 2 do 5 opraviti za vsak obremenitveni primer posebej.

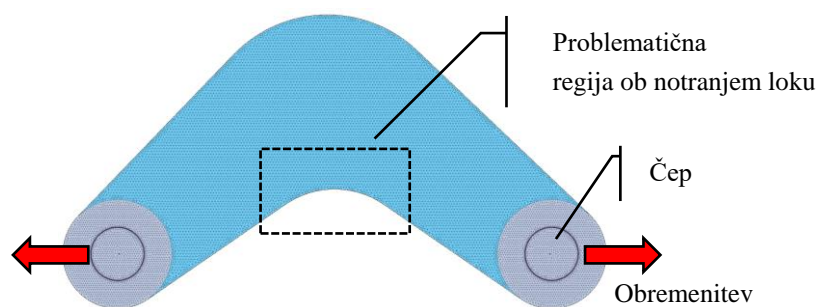
Zgoraj opisani postopek bo generiral topološko optimiran del, ki bo izkazoval – tako intuitivno pričakujemo – nekoliko boljše napetostne razmere, kot pa del, ki bi ga optimirali

izključno z uporabo LE modela. Seveda je treba za končno analizo napetostnega stanja in oceno dejanskih koristi uporabiti pravilni LE materialni model.

## 5 Zgled

Za testni primer smo si zamislili konstrukcijski del, ki je obremenjen preko dveh čepov in mora prenašati natezne obremenitve, slika 1. Njegova domena je namenoma oblikovana tako, da bo resno ovirala razporeditev materiala pri minimizaciji deformacijske energije. Posledično bo v problematični regiji ob notranjem loku vedno prisotna koncentracija napetosti. Zanima nas koliko lahko metode opisane v predhodnih poglavjih izboljšajo to situacijo.

Obravnavan konstrukcijski del je kvazi-ravninski, tako da bo spremljanje prerazporejanja materiala in napetostnega stanja dovolj enostavno. Za diskretizacijo so uporabljeni namenski 4-voziščni tetraedrični končni elementi. Model ima približno 61000 vozlišč in 273000 elementov.

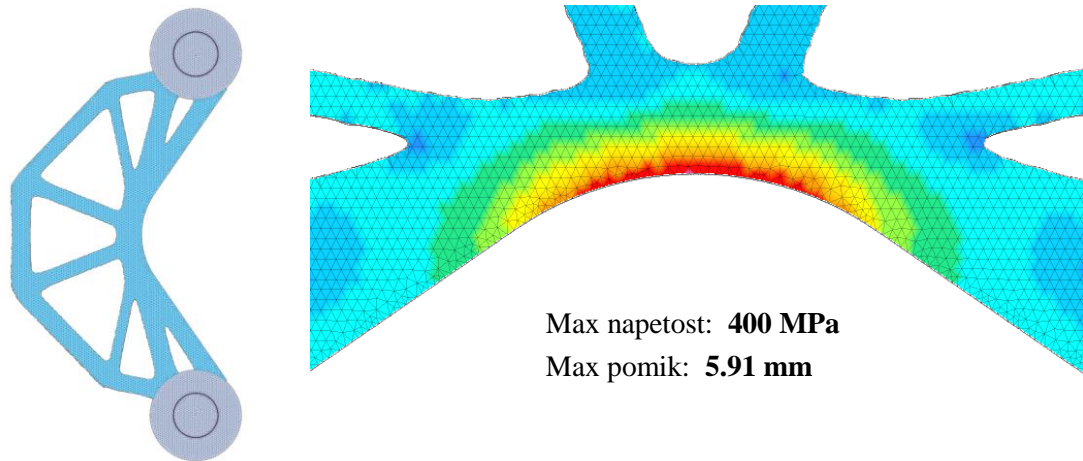


**Slika 1:** Testni primer s problematično regijo ob notranjem loku

Izvedli bomo dva numerična izračuna, in sicer:

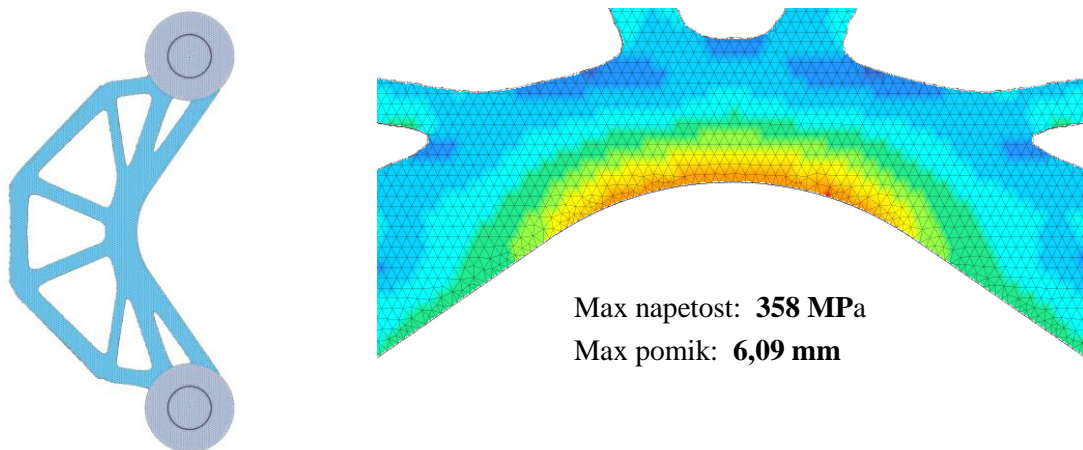
- **Primer A:** optimizacija topologije bo narejena z upoštevanjem izključno LE materialnega modela.
- **Primer B:** optimizacija topologije bo narejena s kombiniranjem LE ter BLE modela v smislu kot je to opisano v predhodnih poglavjih.

V obeh primerih bomo minimizirali deformacijsko energijo, predpisan volumski delež proste regije (obarvana modro na sliki 1) pa znaša 50 %.



**Slika 2:** Rezultati primera A: optimalna oblika in napetostno stanje v notranjem loku

Rezultate primera A prikazuje slika 2. Vidimo lahko, da dobimo ob notranjem loku koncentracijo napetosti, maksimalne vrednosti pa se gibljejo okrog 400 MPa. Sicer se napetosti v prosti (optimirani) regiji gibljejo v povprečju okrog 120 MPa. Maksimalni pomik, ki je pokazatelj togosti konstrukcije, znaša 5,91 mm. V našem primeru je maksimalni pomik enak raztezkju konstrukcije (odmik enega čepa od drugega).



**Slika 3:** Rezultati primera B: optimalna oblika in napetostno stanje v notranjem loku

Rezultat primera A je bil uporabljen kot izhodiščna oblika za zagon optimizacije primera B, kjer smo za BLE material uporabili  $\sigma_1 = 150$  MPa in  $\vartheta = 0,01$ . Rezultate primera B prikazuje slika 3. Ker so se elementi ob notranjem loku razbremenili, je prišlo tokom optimizacije do

prerazporejanja materiala. Ta prerazporeditev je povzročila, da so se napetosti ob notranjem loku zmanjšale na maksimalne vrednosti okrog 358 MPa. Maksimalni pomik pri tem znaša 6,09 mm, kar pomeni, da so nižje napetosti s seboj prinesle tudi manj togo konstrukcijo.

Absolutne vrednosti napetosti in pomikov tukaj nimajo posebnega pomena. To kar je pomembno, je relativna sprememba. V tem kontekstu so se maksimalne napetosti zmanjšale za približno 10 %, maksimalni pomik, in s tem tudi deformacijska energija, pa je narasel za približno 3 %. Tukaj poudarimo, da so te spremembe dosežene z enako količino uporabljenega materiala, ki je v obeh primerih A in B le nekoliko drugače razporejen.

## 6 Eksperiment

Numerični rezultati torej kažejo, da oblika B v notranjem loku izkazuje približno 10 % nižje napetosti kot oblika A. V praksi bi se ta razlika morala poznati pri ciklični natezni obremenitvi, kjer lahko pride do utrujanja materiala ter iniciacije in rasti razpoke. Da bi eksperimentalno preverili te numerične napovedi, smo izdelali nekaj preizkušancev oblike A in enako število preizkušancev oblike B.

Preizkušanci so bili narejeni iz aluminija Al 7075 T6 proizvajalca AMAG. Ta material začne teči pri napetosti okrog 500 MPa, njegova natezna trdnost pa znaša 570 MPa. Debelina pločevine je 3,175 mm. Izrez je bil narejen z laserjem, in sicer tako, da so se lahko vse pomembne rezane površine ustrezno naknadno obdelale s finim frezanjem. S tem smo iz vseh kritičnih rezanih površin odstranili problematično plast, ki je bila staljena od laserskega rezanja. Končni, torej površinsko obdelani preizkušanci, so ustrezali izračunanima oblikama A in B.

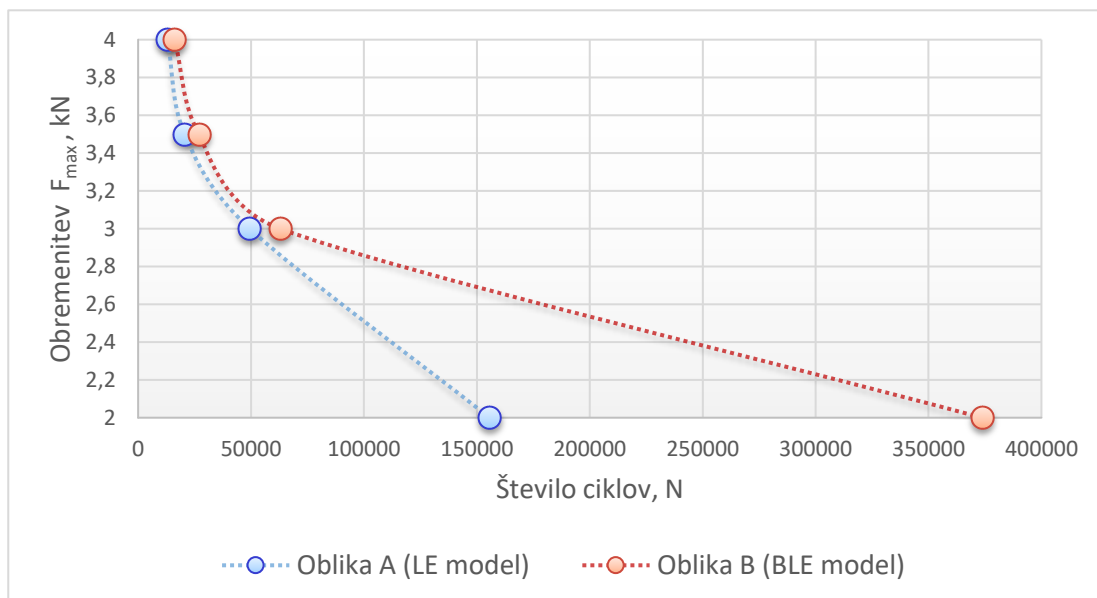


**Slika 4:** Preizkušanca oblike A in B na stroju za testiranje

Vsak preizkus je bil izveden z dvema preizkušancema hkrati – en preizkušanec oblike A in drugi oblike B, slika 4. S tem smo zagotovili povsem enake obremenitvene razmere za oba preizkušanca. Teste smo izvedli s cikličnimi nateznimi obremenitvami s faktorjem  $R = F_{\min}/F_{\max} = 0,1$ . Izbrane maksimalne vrednosti obremenitev  $F_{\max}$  so znašale 2, 3, 3,5 in 4 kN. Tukaj je koristno povedati, da pri obremenitvi 2 kN napetosti v notranjem loku dosežejo približno 50 % meje tečenja za preizkušanec A in približno 45 % meje tečenja za preizkušanec B. Ta odstotek seveda narašča linearno z velikostjo obremenitve.

Obremenjevanje dveh preizkušancev hkrati se je odvijalo tako dolgo, dokler ni prvi preizkušanec počil (v našem primeru je bil to vedno preizkušanec A). Ko se je to zgodilo, smo počen preizkušanec odstranili in test nadaljevali s preostalim preizkušancem vse dokler ni prišlo do porušitve tudi v slednjem.

Število obremenitvenih ciklov do porušitve posameznih preizkušancev je prikazano na diagramu na sliki 5. Vidimo lahko, da razlika v doseženem številu ciklov med preizkušanci A in B ni posebej velika v primeru zelo visokih obremenitev, ko se material praktično že začne plastificirati. Se pa ti rezultati precej spremenijo, ko se napetosti v najbolj obremenjenem materialu enkrat spustijo pod polovico meje tečenja materiala. Na primer, število opravljenih ciklov do porušitve pri obremenitvi 2 kN je za preizkušanec B približno dva in pol krat višje kot za preizkušanec A.



**Slika 5:** Število obremenitvenih ciklov do porušitve za obliki A in B pri različnih maksimalnih obremenitvah

## 7 Zaključek

Glede na dobljene rezultate lahko zaključimo, da je predstavljen pristop za zmanjševanje napetosti vsekakor vredno ohraniti v naboru možnih orodij za izboljšavo končnega rezultata optimizacije. Zaradi njegove izjemne računske učinkovitosti to velja zlasti za situacije, ko imamo opravka z velikimi numeričnimi primeri. Opravljeni testi nakazujejo, da lahko tudi s takšnimi prijemi izboljšamo optimirane oblike v smislu podaljšanja življenjske dobe izdelka.

## Literatura

- [1] J. Cea, S. Garreau, P. Guillaume in M. Masmoudi, *A finite strain beam formulation. The shape and topological optimizations connection*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 188, 713--726, 2000.

- [2] B. Harl, J. Predan, N. Gubeljak N in M. Kegl, *On configuration-based optimal design of load-carrying lightweight parts*. Int. Journal of Simulation Modelling 16(2), 219--228, 2017.
- [3] O. Sigmund in K. Maute, *Topology optimization approaches: A comparative review*, Struct. Multidisc. Optim. 48, 1031--1055, 2013.



## *Vpliv stene vial na prenos toplote in hitrost liofilizacije*

Matjaž Ramšak<sup>1</sup> in Matjaž Hriberšek<sup>1</sup>

### *Influence of vial wall on heat transfer and lyophilisation*

**Povzetek.** V prispevku smo prikazali 2D osnosimetrično numerično simulacijo sublimacijskega sušenja Mannitola z metodo robnih elementov. Izvirnost pristopa je v simulaciji prenosa toplote v stenah vial kot dodatna računska domena. Običajen pristop modeliranja vial je obravnava le te kot dodatni toplotni upor v empiričnem modelu prehoda toplote na vsebino v viali, pri čemer se zanemari prevod toplote v stenah vial v vzdolžni smeri, ki je neposredno odvisna od toplotne prevodnosti in debeline materiala vial. Numerični model smo validirali z meritvami iz literature. Analizirali smo vpliv toplotne prevodnosti stene vial na hitrost liofilizacije v odvisnosti od tlaka procesa. Največja pohiritev sublimacije oziroma povečan prenos toplote znaša 4.5 % za hipotetično vialo toplotne prevodnosti 100 W/(mK) v primerjavi z običajno stekleno enakih debelin.

**Abstract.** A 2D axisymmetric numerical simulation of freeze drying of Mannitol using the boundary element method is presented. The originality of the approach lies in the simulation of heat transfer in the walls of the vial as an additional computational domain. The usual approach to vial modelling is to treat this as an additional heat resistance in an empirical model of heat transfer to vial contents, neglecting heat transfer in the vial walls in the longitudinal direction directly dependent on thermal conductivity and vial material thickness. The numerical model was validated with measurements from the literature. The influence of the thermal conductivity of the vial wall on the lyophilization rate depending on the process pressure was analysed. The maximum acceleration of sublimation or increased heat transfer is 4.5 % for a hypothetical vial of thermal conductivity of 100 W/(mK) compared to conventional glass vial of the same thickness.

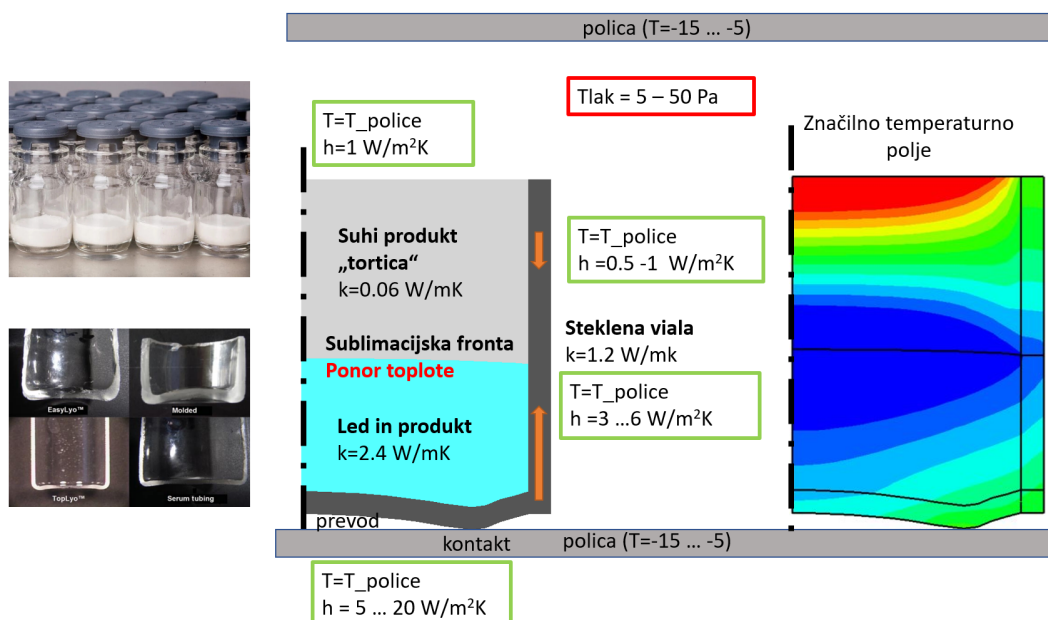
## 1 Uvod

Želja farmacevtov je čim bolj skrajšati čas sublimacijskega sušenja ali krajše liofilizacije. S tem namenom v pričujočem prispevku spreminjamo toplotno prevodnost vial in raziščemo vpliv na hitrost liofilizacije s pomočjo osnosimetrične numerične simulacije z metodo robnih elementov.

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

Velika večina numeričnih simulacij liofilizacije upošteva steno vial le kot toplotni upor v modelu prehoda toplote iz police na vsebino vial [2]. Na takšen način se zanemari prevod toplote v vzdolžni smeri stene vial. Značilni primer toplotnih razmer smo prikazali na sliki 1. Iz temperaturnega polja je lepo razviden ponor toplote na sublimacijski fronti s temno modro barvo. Kot je razvidno iz vrednosti  $h$ , večina potrebne sublimacijske toplote prehaja od police preko dna vial in dobro prevodnega ledu do fronte sublimacije. Sledi toplota iz strani, predvsem spodnji del, ki je v kontaktu z ledom. Toplota iz suhega produkta oz. tortice, ki je praktično toplotni izolator, je praktično zanemarljiva in služi le gretju suhega produkta iz vrha. Z večanjem toplotne prevodnosti in debeline stene vial se večja tudi prispevek prevoda toplote v steni vial v vzdolžni smeri. Namen članka je podati kvantitativno pohitritev procesa z uporabo toplotno prevodnejših materialov v primerjavi z običajno stekleno vialo in upočasnitev procesa plastične vial.



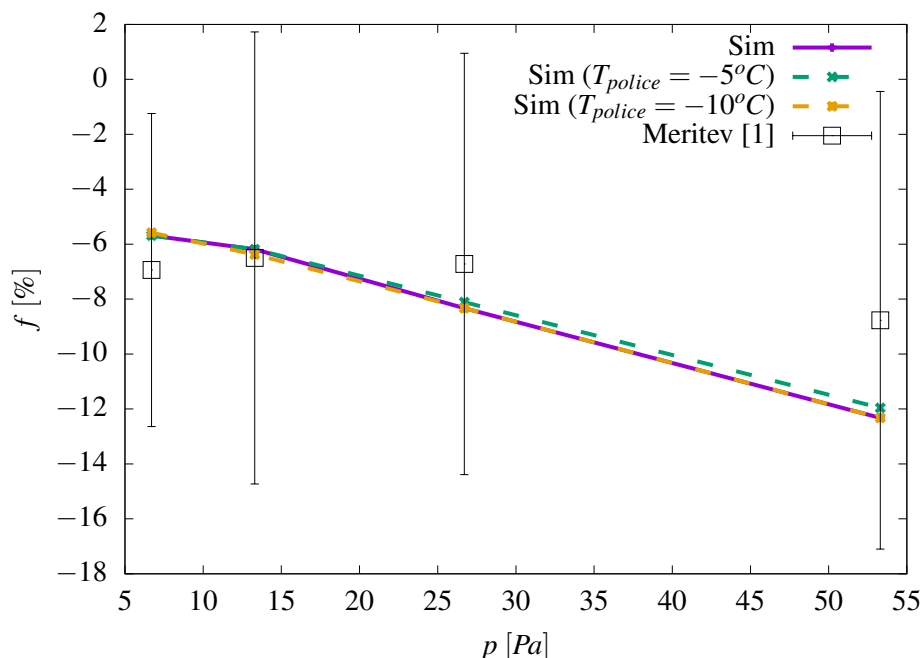
**Slika 1:** Značilni parametri, robni pogoji in temperature pri liofilizaciji. Razpon številskih vrednosti toplotne prehodnosti ( $h$ ) ustrezajo malim in velikim tlakom procesa. Fotografije iz [1].

Raziskava vpliva materiala vial in tudi načina izdelave le te na hitrost sublimacije je eksperimentalno raziskana v članku avtorjev Hibler in ostali iz leta 2012 [1]. Avtorji navajajo celo 30% variacijo gravimetričnega  $K_v$ , ki smo ga natančneje opisali v en. (1), pri uporabi različnih vial.

Struktura članka je sledeča. Po uvodu ne bomo predstavljali vodilnih enačb procesa niti numerične sheme metode robnih elementov, saj so bile le te na Kuhljevih dnevih večkrat predstavljene in so natančno podane tudi v [3]. Sledi validacijski primer, kjer izračunamo razmerje hitrosti sublimacije za plastično in stekleno vialo ter rezultat primerjamo z meritvami [1] pri različnih tlakih procesa. Naslednje poglavje je ključno, kjer analiziramo vpliv toplotne prevodnosti vial na hitrost sublimacije. Članek se konča z zaključki.



## 2 Validacija z meritvami



**Slika 2:** Validacija numeričnih rezultatov z meritvami [1] vpliva materiale viala na prenos toplote oziroma upočasnitev plastične viala v primerjavi s stekleno vialo (faktor  $f$ , enačba (3)) v odvisnosti od tlaka sublimacije ( $p$ ). Temperatura police je  $-5^{\circ}C$  za tlaka 7 in 13 Pa ter  $-10^{\circ}C$  za 27 in 53 Pa. Za primerjavo smo dodali tudi dve seriji simulacij za konstantno temperaturo police  $-5^{\circ}C$  in  $-10^{\circ}C$  za vse tlake.

Rezultate simulacije primerjamo z meritvami [1]. Namen meritev v omenjenem članku je primerjati hitrost liofilizacije za različne viala: po materialu in načinu izdelave. Merili so sublimacijo čistega ledu pri različnih tlakih liofilizacije. Hitrost liofilizacije je premo sorazmerna z gravimetričnim  $K_v$ -jem, ki je v fizikalnem smislu enak toplotni prehodnosti v  $W/(m^2K)$ . Izračunamo ga z

$$K_v = \frac{\frac{dm}{dt} \Delta H_s}{A_v(T_s - T_b)}, \quad (1)$$

kjer je  $\frac{dm}{dt}$  izmerjena hitrost sublimacije,  $\Delta H_s$  sublimacijska toplota,  $A_v$  zunanji presek viala in  $(T_s - T_b)$  temperaturna razlika med polico in dnom viala. Produkt  $\frac{dm}{dt} \Delta H_s$  je izračunani povprečni toplotni tok v vialo  $\bar{Q}$

$$\bar{Q} = \frac{dm}{dt} \cdot \Delta H_s = K_v A_v (T_s - T_b). \quad (2)$$

Skladno z namenom validacije meritve normaliziramo s  $K_v$ -jem običajne viala iz stekla in primerjamo le razmerja  $K_v$ -jev pri spremembi materiala viala iz stekla v plastiko pri tej validaciji.

Rezultat brezdimenzionaliziranja  $K_v$ -jev označimo s faktorjem pohitritve oziroma upočasnitve liofilizacije  $f$  v [%], ki ga izračunamo z naslednjim izrazom

$$f = \frac{K_{v,plastika} - K_{v,steklo}}{K_{v,steklo}} * 100 [\%], \quad (3)$$

kjer za referenčni  $K_v$  uporabimo običajno vialo iz stekla.

Na ta način izločimo mnogo neznanih robnih pogojev in geometrijskih veličin. Med ostalimi tudi dejstvo, da so meritve izvedli z liofilizacijo čistega ledu, medtem ko je simulacija narejena za liofilizacijo Manitol, ki je raztopina vode in učinkovine, ki je podobna sladkorju. Predpostavimo torej, da je vpliv vial na prenos toplote enak ne glede na liofilizacijo vsebine. Ker je toplotna prevodnost vial najpomembnejši parameter validacije je naslednja predpostavka simulacije enaka geometrija vial in robni pogoji toplotne prestopnosti iz liofilizacijske naprave na vialo: empirični izračun kontaktne upornosti med vialo in polico ter toplotne prestopnosti na ostalih površinah, [2]. Upoštevamo tudi vpliv spremembe gostote in toplotne kapacitivnosti materiala vial, čeprav je ta zanemarljiv, saj je proces liofilizacije na splošno zelo počasen. V simuliranem primeru traja približno 50 ur. Snovne lastnosti vial so zbrane v tabeli 1.

**Tabela 1:** Snovne lastnosti vial

material	Viala	top. prevodnost [W/(mK)]	spec. toplota [J/(kgK)]	gostota [kg/m <sup>3</sup> ]	term. difuzivnost [m <sup>2</sup> /s]
steklo	EasyLyo	1.2	800	2500	6.0e-7
plastika	Top pac	0.135	1200	1020	1.1e-7

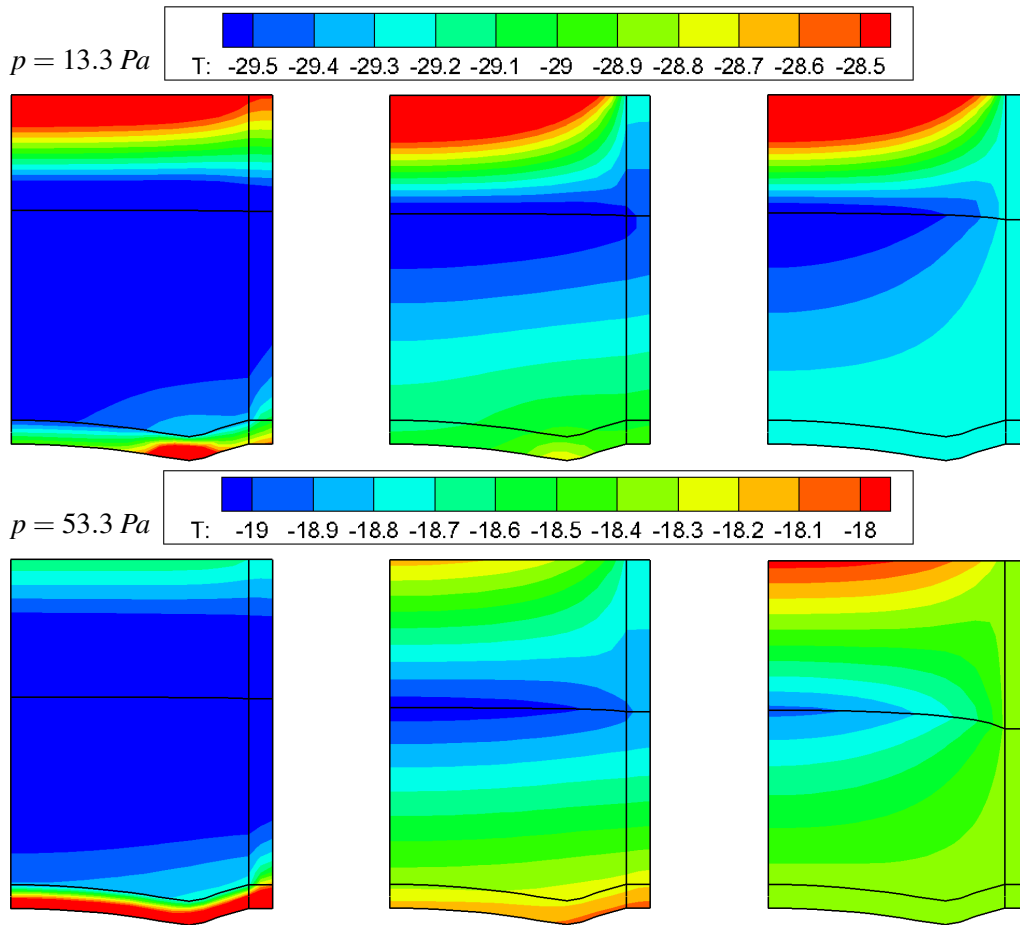
Robni pogoji in podatki, ki so skupni vsem simulacijam v tem prispevku, so prikazani na sliki 1 in naštetih tukaj: tip vial A20-C8, polnitev 4 ml, vsebina polnitve Mannitol, pozicija vial na centru sredinske police, začetna temperatura zamrznitve -35 °C, čas dviga na temperaturo police 40 minut.

Skladno s pričakovanji je pohitritev oziroma upočasnitev liofilizacije praktično neodvisna od temperature police z tlakom pa zelo. Dejstvo je, da se prehod toplote večja z večanjem tlaka. In pri najmanjšem tlaku prehod toplote med polico in vialo predstavlja ozko grlo ter posledično material vial nima posebnega vpliva. Z večanjem tlaka in posledično večanjem prenosa toplote, postaja prevodnost vial pomembna in z njo tudi temperaturna razlika med vialo in polico.

Spomnimo, da je namen primera validacija numeričnih rezultatov. Le ti se odlično ujemajo z meritvami pri vseh tlakih, kakor tudi za vse temperature polic.

### 3 Vpliv prevodnosti vial na hitrost sublimacije

Namen pričujočega poglavja je določiti vpliv prevodnosti vial na hitrost sublimacije. Kot pri validaciji, tudi tokrat izračunamo spremembo gravimetričnega  $K_v$  v primerjavi s stekleno vialo. Predpostavke testnega primera in pogoji liofilizacije so naslednji:



plastika ( $k = 0.135 \text{ W}/(mK)$ )    steklo ( $k = 1.2 \text{ W}/(mK)$ )    aluminij ( $k = 220 \text{ W}/(mK)$ )  
**Slika 3:** Izolinije temperatur ( $T$  [ $^{\circ}\text{C}$ ]) v času 10 h po začetku liofilizacije in tlaku 13.3 Pa (zgoraj) ter 53.3 Pa (spodaj) v odvisnosti od materiala viala.

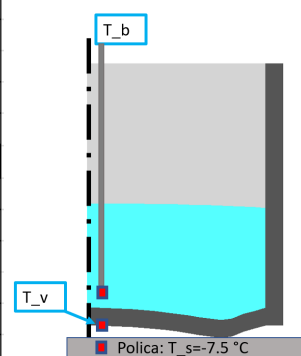
- spreminja se samo prevodnost viala, gostota in specifična toplota so enake kot pri steklu. To predpostavko opravičujemo s počasnostjo procesa,
- temperatura police je  $-7.5 \text{ }^{\circ}\text{C}$  pri vseh tlakih in
- ostali pogoji liofilizacije so enaki kot pri validacijskem primeru.

Na sliki 3 smo prikazali temperaturna polja za različne materiale stene viala in za dva različna tlaka v enakem času 10 ur po začetku. Ustrezne kvantitativni podatki so zbrani v tabeli 2 in grafu pohitritve sublimacije  $f$  na sliki 4. Zgolj s primerjavo slik zapišemo naslednje kvalitativne ugotovitve.

- Ker je višina sublimacijske fronte pri večjem tlaku nižja (slika 3), se z večanjem tlaka večja prehod toplote na vialo. In tudi vpliv stene viala. Sublimacija je hitrejša.
- Z večanjem toplotne prevodnosti viala se temperaturne razlike v stenah viala manjšajo ter posledično tudi v vsebini viala.

**Tabela 2:** Temperaturne razlike pomembne za izračun prenosa toplote.  $T_b$  je temperatura (običajno tudi merjena) ledu pri dnu vial, odločilna za izračun gravimetričnega  $K_v$ , en. (1).  $T_v$  je temperatura zunanje stene vial pomembne za termodinamično pravilni izračun prehoda toplote med polico in steno vial. Časi se nanašajo na sliko 3. Z *delta* smo označili zmanjšanje temperaturne razlike po en. (3), pri čemer je referenčna razlika ( $T_s - T_b$ ). Zadnja vrstica ( $T_v - T_b$ ) je približna temperaturna razlika stene vial v prečni smeri.

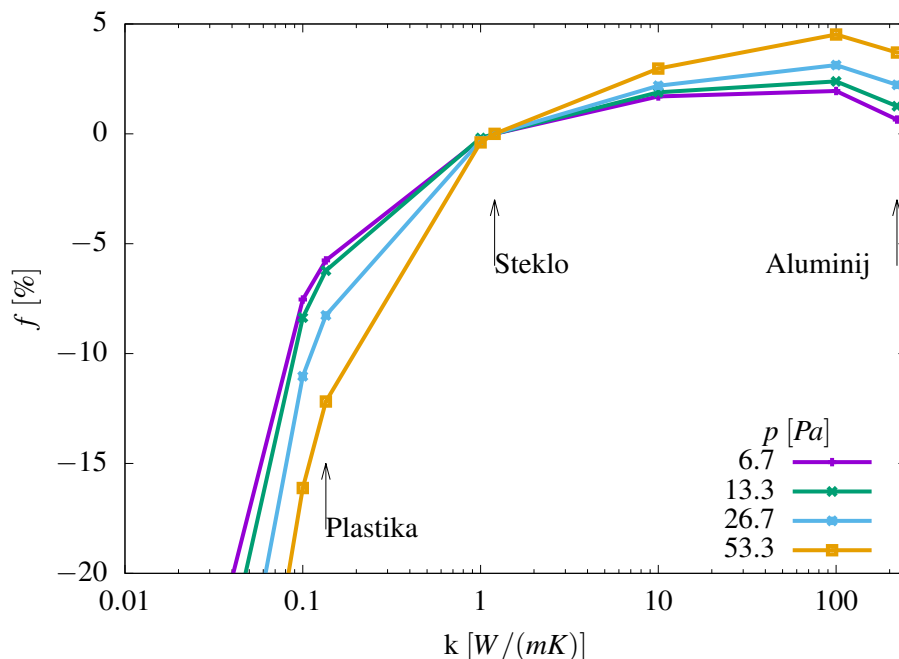
Tlak liofilizacije: 13.3 Pa						
	Plastika		Steklo		Aluminij	
čas [h]	10	22	10	22	10	22
( $T_s - T_b$ ) [C]	22.1	19.4	21.7	19.0	21.7	18.9
( $T_s - T_v$ ) [C]	21.5	18.8	21.5	18.9	21.7	18.9
delta [%]	-2.8	-3.2	-0.9	-0.5	0.0	0.0
( $T_v - T_b$ ) [C]	0.6	0.6	0.2	0.1	0	0
Tlak liofilizacije: 53.3 Pa						
	Plastika		Steklo		Aluminij	
čas [h]	10	22	10	22	10	22
( $T_s - T_b$ ) [C]	11.5	9.9	10.9	9.3	10.9	9.2
( $T_s - T_v$ ) [C]	9.9	8.5	10.6	9.1	10.9	9.2
delta [%]	-16.2	-16.5	-2.8	-2.2	0.0	0.0
( $T_v - T_b$ ) [C]	1.6	1.4	0.3	0.2	0	0



- Z večanjem prevodnosti vial se večja temperaturna razlika med steno vial in polico, kar večja prehod toplote v en. (2).
- Očitno povečana prevodnost stene vial poveča prenos toplote iz toplega dna vial proti ponoru toplote na sublimacijski fronti. Analogno se večja tudi prenos toplote iz toplega vrha vial proti sublimacijski fronti.
- Z večanjem prevodnosti vial se ukrivljenost sublimacijske fronte večja. Prav tako tudi z večanjem tlaka. V primeru plastične vial je temperatura sublimacijske fronta skoraj ravna in posledično je ravnostni tlak vodne pare konstanten in z njim tudi lokalna hitrost sublimacijske fronte. V primeru aluminijaste vial se temperatura sublimacijske fronte v bližini stene vial večja in z njo tudi lokalna hitrost ter posledičnost ukrivljenost fronte.

V primeru plastične vial pri nizkem tlaku (prva slika na sliki 3) je lepo razvidno povečanje temperature stene vial pri neposrednem kontaktu s *toplo* polico. Podajamo še najpomembnejše kvantitativne podatke iz tabele 2 in grafu pohitritve na sliki 4.

- Plastična viala je počasnejša od steklene za 5.8 % pri tlaku 6.7 Pa in 12.8 % pri najvišjem tlaku 53.3 Pa.
- Aluminijasta viala je le malo hitrejša od steklene za 3.7 % pri najvišjem tlaku.
- Plastična viala ima večjo temperaturno razliko med temperaturo ledu in polico za 0.5 °C v primerjavi s stekleno in to je neodvisno od tlaka.
- Obstaja optimum toplotne prevodnosti za maksimalno pohitritev sublimacije. Pri vseh tlakih je ta optimum pri  $k = 100 \text{ W}/(\text{mK})$ . Zanimivo je, da najbolj prevodna aluminijasta viala ni tudi najhitrejša.

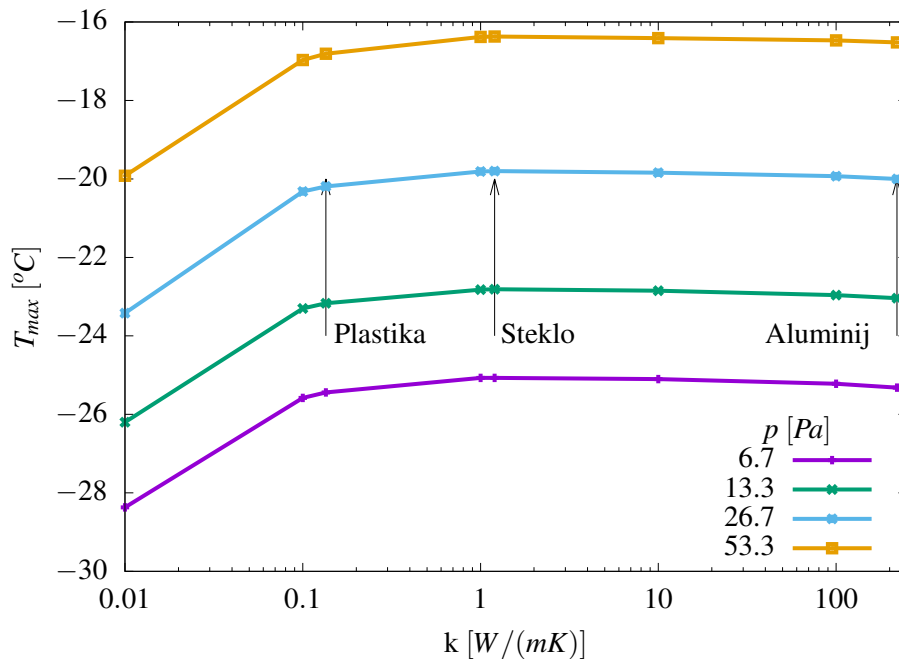


**Slika 4:** Hitrost sublimacije (faktor  $f$ , enačba (3)) v odvisnosti od toplotne prevodnosti vialo ( $k$ ) in tlaka sublimacije ( $p$ ). Temperatura police je  $-7.5^{\circ}\text{C}$ .

- Največja pohitritev pri največjem tlaku znaša 4.5 % za hipotetično vialo toplotne prevodnosti 100 W/(mK) in enake debeline kot steklena.

### 3.1 Vpliv na maksimalno temperaturo ledu – nevarnost kolapsa

Pri procesu liofilizacije je pomembno, da temperatura ledu ne preseže temperature kolapsa. Kolaps imenujemo pojav taljenja ledu in sesedanja suhega produkta. Temperatura kolapsa je odvisna od produkta sušenja in običajna vrednost je približno  $-12^{\circ}\text{C}$ . Nevarnost kolapsa se povečuje pri agresivnih protokolih sušenja: večanjem tlaka in temperature police ter posledično višjim hitrostim sušenja. Relativno mali vpliv prevodnosti vialo na maksimalno temperaturo ledu je prikazan na sliki 5. Natančnejša analiza daje maksimum temperature in s tem največjo nevarnost kolapsa pri konstantnem tlaku za stekleno vialo pri vseh tlakih. Za plastično vialo se maksimalna temperatura zmanjša za  $0.5^{\circ}\text{C}$ , z aluminijasto pa le za približno  $0.3$  stopinje. Numerične simulacije kažejo, da se te vrednosti ne spreminjajo pomembno s tlakom.



**Slika 5:** Nevarnost kolapsa oziroma maksimalna temperatura ledu v odvisnosti od toplotne prevodnosti viala ( $k$ ) in tlaka sublimacije ( $p$ ).

#### 4 Zaključki

V prispevku smo predstavili vpliv toplotne prevodnosti stene viala na hitrost sublimacijskega sušenja z numerične simulacijo lastnega programa na osnovi metode robnih elementov.

- Uspešna validacija numeričnih simulacij z meritvami [1].
- Z vidika farmacevtov je najpomembnejše, da je maksimalna pohitritev sublimacije 4.5 % v primerjavi s stekleno vialo ni dobljena za najprevodnejšo aluminijasto vialo 220 W/(mK), ampak s hipotetično vialo prevodnosti 100 W/(mK) pri najvišjem tlaku.

#### Literatura

- [1] S. Hibler, C. Wagner, and H. Gieseler. Vial freeze-drying, part 1: New insights into heat transfer characteristics of tubing and molded vials. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 101(3):1189–1201, 2012.
- [2] M. J. Pikal, M. L. Roy, and S. Shah. Mass and heat transfer in vial freeze-drying of pharmaceuticals: Role of the vial. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 73(9):1224–1237, 1984.
- [3] M. Ramšak, J. Ravnik, M. Zdravec, M. Hriberšek, and J. Iljaž. Freeze-drying modeling of vial using bem. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 77:145–156, 2017.



## *Metoda temeljnih rešitev za dvofazni Stokesov tok*

*Zlatko Rek<sup>1</sup> in Božidar Šarler<sup>1</sup>*

### *Method of fundamental solutions for two-phase Stokes flow*

**Povzetek.** Za reševanje enačb dvofaznega Stokesovega toka v 2D geometriji je bila uporabljena metoda temeljnih rešitev s tehniko podobmočij. Metoda je enostavna, računsko učinkovita in zelo natančna. Predstavljen je algoritem, s katerim v iterativnem postopku izračunamo obliko medfazne meje. Uspešnost tega pristopa je prikazana na primeru kapljevinskega curka v vzporednem toku plina. Primerjava oblike medfazne meje oz. debeline curka po predstavljeni formulaciji in referenčno numerično rešitvijo po metodi kontrolnih volumnov pokaže uspešnost metode temeljnih rešitev za obravnavo problemov dvofaznega Stokesovega toka.

**Abstract.** The method of fundamental solutions with the subdomain technique was used to solve the equations of two-phase Stokes flow in 2D geometry. The method is simple, computationally efficient and very accurate. An algorithm is presented to calculate the shape of the interfacial boundary in an iterative procedure. The success of this approach is shown in the case of a liquid jet in a parallel gas flow. Comparison of the shape of the interphase boundary or the thickness of the jet according to the presented formulation and the reference numerical solution by the method of control volumes shows the success of the method of fundamental solutions for dealing with the problems of two-phase Stokes flow.

## 1 Uvod

Serijska femtosekundna kristalografija [6] pridobiva v zadnjem obdobju čedalje večji pomen, saj omogoča zelo natančen vpogled v strukturo bioloških materialov, kot so npr. proteini. Biološki vzorec v kristalni obliki s pomočjo kapljevine v kontinuiranem curku dostavijo v pulzirajoči snop rentgenskih žarkov, ki se na kristalni strukturi ukloni. Z analizo zelo velikega števila tako dobljenih uklonskih slik je možno rekonstruirati strukturo materiala na nanometrski skali.

Kapljevinski curek s kristali mora biti čim tanjši in stabilen. To dosežemo s šobo za fokusiranje toka, glej [8], kjer z njeno obliko dosežemo, da vzporedni hitri tok plina, ki obdaja curek, onemogoča njegovo prehitro razširitev in razpad. Dimenzije šob se merijo v mikrometrih, zato lahko kljub veliki hitrosti plina in kapljevine takšen dvofazni tok v prvem približku obravnavamo kot Stokesov tok, saj je Reynoldsovo število  $\approx 1$ .

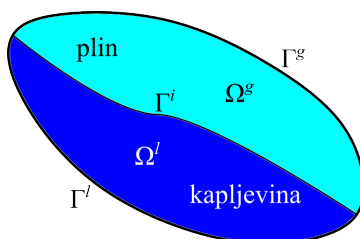
---

<sup>1</sup>Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

Stokesov tok predstavlja ustaljeni tok tekočine, kjer ni volumske sile, vztrajnostna sila pa je zanemarljiva v primerjavi z viskozno silo [10]. Za to enačbo obstaja temeljna rešitev, zato v tem prispevku uporabljamo metodo temeljnih rešitev (MFS) [2]. Poglavitna prednost te metode je, da ne potrebujemo računske mreže in ni numerične integracije ali vrednotenja singularnih funkcij. Je resnično brez mrežna metoda. Preprost in zelo natančen direktni izračun odvodov spremenljivk je še ena od prednosti MFS. Ker imamo dve fazi, ki se ne mešata, uporabimo tehniko podobmočij [12] z deformabilno medfazno mejo. Postopek določitve oblike stika faz in zglede sta predstavljena v nadaljevanju.

## 2 Metoda temeljnih rešitev

Iščemo rešitev Stokesove enačbe v 2D območju  $\Omega = \Omega^l \cup \Omega^g$ , ki je sestavljeno iz dveh podobmočij. Indeks  $l$  predstavlja območje kapljevite faze, indeks  $g$  pa območje plinaste faze. Rob območja sestavljajo trije deli  $\Gamma = \Gamma^l \cup \Gamma^g \cup \Gamma^i$ , kjer je  $\Gamma^l$  meja med kapljevito fazo in okolico,  $\Gamma^g$  meja med plinasto fazo in okolico, ter  $\Gamma^i$  meja med fazama (medfazni rob), slika 1. V našem primeru je povsod na zunanjem robu predpisana hitrost  $\vec{v} = (\bar{v}_x, \bar{v}_y)$ .



**Slika 1:** Računsko območje z dvofaznim Stokesovim tokom.

Stokesov tok opišeta enačbi:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1)$$

$$-\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

kjer so:  $\vec{v}$  – vektor hitrosti,  $P$  – tlak in  $\mu$  – koeficient dinamične viskoznosti.

Na medfazni meji  $\Gamma^i$  hitrost ni znana, zato moramo enačbama (1)–(2) dodati še enačbe ravnotežnega pogoja, glej [5]:

– kinematični 
$$\mathbf{v}_l = \mathbf{v}_g, \quad (3)$$

– normalne napetosti 
$$2\mu_l \mathbf{n}_l \cdot \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{n}_l - 2\mu_g \mathbf{n}_g \cdot \mathbf{S}_g \cdot \mathbf{n}_g = 0, \quad (4)$$

– tangencialne napetosti 
$$2\mu_l \mathbf{t}_l \cdot \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{n}_l - 2\mu_g \mathbf{t}_g \cdot \mathbf{S}_g \cdot \mathbf{n}_g = 0, \quad (5)$$

da je število enačb enako številu neznank.

Enotska normala in tangenta na medfaznem robu sta  $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$  in  $\mathbf{t} = (-n_y, n_x)$ , pri čemer velja  $\mathbf{n}_g = -\mathbf{n}_l$  in  $\mathbf{t}_g = -\mathbf{t}_l$ .

Simetrični deformacijski tenzor je definiran kot



$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 \frac{\partial u}{\partial x} & , & \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} & , & 2 \frac{\partial v}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (6)$$

Po MFS sistem (1)–(5) rešimo z nastavkom:

$$v_x(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^N \alpha_j^x V_{xx}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}_j) + \sum_{j=1}^N \alpha_j^y V_{xy}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}_j), \quad (7)$$

$$v_y(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^N \alpha_j^x V_{yx}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}_j) + \sum_{j=1}^N \alpha_j^y V_{yy}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}_j), \quad (8)$$

$$P(\mathbf{p}) = \sum_{j=1}^N \alpha_j^x P_x^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}_j) + \sum_{j=1}^N \alpha_j^y P_y^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}_j), \quad (9)$$

kjer je  $N$  število točk na robu  $\Gamma$  (kolokacijske točke),  $\alpha^x$  in  $\alpha^y$  sta vektorja zaenkrat neznanih koeficientov. Globalne aproksimacijske funkcije (temeljne rešitve 2D Stokesovih enačb) [4] so:

$$V_{xx}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) = \frac{1}{8\pi\mu} \left( -2 \ln r(\mathbf{p}, \mathbf{s}) + \frac{2(p_x - s_x)^2}{r^2(\mathbf{p}, \mathbf{s})} - 3 \right), \quad (10)$$

$$V_{yy}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) = \frac{1}{8\pi\mu} \left( -2 \ln r(\mathbf{p}, \mathbf{s}) + \frac{2(p_y - s_y)^2}{r^2(\mathbf{p}, \mathbf{s})} - 3 \right), \quad (11)$$

$$V_{xy}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) = V_{yx}^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) = \frac{1}{8\pi\mu} \frac{2(p_x - s_x)(p_y - s_y)}{r^2(\mathbf{p}, \mathbf{s})}, \quad (12)$$

$$P_x^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) = \frac{1}{2\pi} \frac{p_x - s_x}{r^2(\mathbf{p}, \mathbf{s})}, \quad (13)$$

$$P_y^*(\mathbf{p}, \mathbf{s}) = \frac{1}{2\pi} \frac{p_y - s_y}{r^2(\mathbf{p}, \mathbf{s})}, \quad (14)$$

kjer je  $r = \sqrt{(p_x - s_x)^2 + (p_y - s_y)^2}$  razdalja med kolokacijsko točko  $\mathbf{p}$  in izvorno točko  $\mathbf{s}$ . Kolokacijskim točkam  $\mathbf{p}_j$  pripadajo izvorne točke  $\mathbf{s}_j$ , ki so od njih oddaljene za razdaljo  $d_{ps}$  v smeri zunanje normale na rob. Izvorne točke tvorijo t. i. umetni rob  $\Gamma'$ . Razdalja  $d_{ps}$  je načeloma poljubna, a obstaja optimalna vrednost, pri kateri je napaka metode najmanjša, glej [3].

Enačbi (7) in (8) in zapišemo za vse kolokacijske točke. Ko upoštevamo še enačbe ravnotežnega pogoja (3)–(5) ter robne pogoje, dobimo sistem linearnih enačb za neznanne koeficiente  $\alpha^x$  in  $\alpha^y$

$$\begin{bmatrix} A_{xx} & A_{xy} \\ A_{yx} & A_{yy} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha^x \\ \alpha^y \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B_x \\ B_y \end{Bmatrix}, \quad (15)$$

pri čemer sistemsko matriko  $[A]$  sestavljajo prispevki temeljnih rešitev in vektor desnih strani  $\{B\}$  znane hitrosti na zunanjem robu. Podrobnosti o strukturi matrike in vektorja so opisane v [12]. Ko sistem linearnih enačb (15) rešimo, lahko v poljubni točki  $\mathbf{p}$  območja  $\Omega$  eksplisitno iz enačb (7) in (8) izračunamo hitrost in iz enačbe (9) tlak. Prav tako lahko zelo enostavno izračunamo odvode hitrosti in tlaka z odvajanjem enačb (7)–(9), glej [12].

### 3 Deformacija medfazne meje

Določitev medfazne meje poteka po iterativnem postopku, kjer v vsaki iteraciji rešimo sistem enačb (15) in izračunamo hitrost v  $N^i$  kolokacijskih točkah medfaznega roba  $\Gamma^i$  po enačbah (7) in (8). Te hitrosti določajo premik kolokacijskih točk na novo pozicijo. Iteracije ponavljamo, dokler ne dosežemo ustaljenega stanja, kar pomeni, da je največji premik katerekoli točke medfaznega roba  $\Gamma^i$  manjši od predpisane vrednosti  $\epsilon$ . Koraki algoritma so podrobneje opisani v nadaljevanju:

0. *Začetno stanje*

Po začetni obliki medfazne meje razporedimo  $N^i$  kolokacijskih  $\mathbf{p}^i$  in pripadajočih izvornih  $s^i$  točk. V teh točkah po prej opisanem postopku izračunamo hitrosti.

1. *Premik kolokacijskih točk ( $\mathbf{p}^i \rightarrow \tilde{\mathbf{p}}^i$ )*

Kolokacijske točke premaknemo v smeri vektorja hitrosti

$$\tilde{\mathbf{p}}_j^i = \mathbf{p}_j^i + \tau_j \mathbf{v}(\mathbf{p}_j^i), j = 1, \dots, N^i. \quad (16)$$

Izraz

$$\tau_j = f \Delta_{min} / \mathbf{v}_{max} \quad (17)$$

ima dimenzijo časa in predstavlja spremenljivi časovni korak. Najvišja hitrost na medfaznem robu je

$$\mathbf{v}_{max} = \max(\{\mathbf{v}(\mathbf{p}_j^i) : j = 1, \dots, N^i\}). \quad (18)$$

Velikost pomika je omejena. Največji dovoljen pomik točk določimo s produktom faktorja  $f$  in minimalne razdalje med sosednjimi točkami medfaznega roba

$$\Delta_{min} = \min(\{|\mathbf{p}_{j+1}^i - \mathbf{p}_j^i| : j = 1, \dots, N^i - 1\}). \quad (19)$$

Pri vrednosti  $f = 0,5$  je tako največji pomik medfazne meje  $\frac{1}{2}$  minimalne razdalje med sosednjimi kolokacijskimi točkami.

2. *Glajenje medfazne meje ( $\tilde{\mathbf{p}}^i \rightarrow \bar{\mathbf{p}}^i$ )*

Ko premaknemo kolokacijske točke, postane medfazni rob precej negladek (nazobčan), zato ga je potrebno zgladiti. Uporabimo npr. preprosto 7-točkovno formulo [7]

$$\bar{\mathbf{p}}_j^i = (-\tilde{\mathbf{p}}_{j-3}^i + 9\tilde{\mathbf{p}}_{j-1}^i + 16\tilde{\mathbf{p}}_j^i + 9\tilde{\mathbf{p}}_{j+1}^i - \tilde{\mathbf{p}}_{j+3}^i) / 32, j = 4, \dots, N^i - 3. \quad (20)$$

3. *Repozicija kolokacijskih točk ( $\bar{\mathbf{p}}^i \rightarrow \hat{\mathbf{p}}^i$ )*

Po premiku točk in glajenju medfazne meje je njihova porazdelitev po medfaznem robu precej neenakomerna. Na določenih mestih so točke zgoščene, na drugih pa razredčene. Za natančnost izračuna je priporočljivo, da so kolokacijske točke, in s tem tudi izvorne točke, po robu razporejene približno ekvidistantno. Za ekvidistantno repozicijo točk po medfaznem robu uporabimo kubični interpolacijski zlepek (ang. spline)  $S$ , glej [11],

$$\hat{\mathbf{p}}_j^i = S(\bar{\mathbf{p}}_j^i), j = 1, \dots, N^i. \quad (21)$$

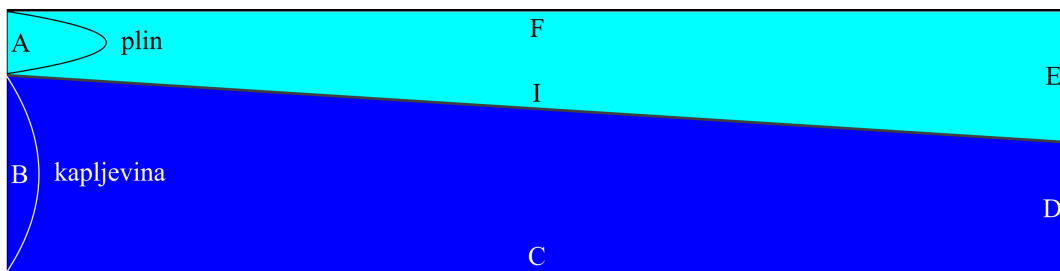
#### 4. Posodobitev medfazne meje

Ko smo v predhodnem koraku izračunali nove koordinate kolokacijskih točk, z odvajanjem interpolacijskega polinoma analitično izračunamo še normalo, tangento in ukrivljenost v teh točkah. Novi vektor normale  $\hat{n}^i$  določa tudi novo lokacijo izvornih točk  $\hat{s}^i$ . Preverimo konvergenco. Če je  $|\hat{p}^i - p^i| > \epsilon$  posodobimo medfazni rob:  $\hat{p}^i \rightarrow p^i$ ,  $\hat{s}^i \rightarrow s^i$ ,  $\hat{n}^i \rightarrow n^i$  ter ponovimo korake 1-4; v nasprotnem smo dosegli ustaljeno obliko medfazne meje in končamo izračun.

#### 4 Primer: Curek kapljevine v vzporednem toku plina

Predstavljeno metodo uporabimo za obravnavamo curka kapljevine v vzporednem toku plina. Zgled je poenostavljen 2D primer šobe za fokusiranje toka (ang. flow focusing nozzle) [9].

Imamo 2D kanal dolžine  $L = 4$  m in višine  $H = 1$  m, slika 2. Na robu A v kanal vstopa plin, na robu B pa kapljevina. Vstopna tokova sta popolnoma razvita (parabolični hitrostni profil). Ker sta volumska pretoka faz enaka  $\dot{V}_l = \dot{V}_g = 0,75 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$  in je  $B = 3 A$ , je povprečna hitrost plina  $\bar{v}_g = 3 \text{ m/s}$  3× večja od povprečne hitrosti kapljevine  $\bar{v}_l = 1 \text{ m/s}$ . Za obe fazi predpišemo enako vrednost koeficienta dinamične viskoznosti  $\mu_l = \mu_g = 1 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Zaradi tako izbranih pogojev je na izstopu hitrostni profil paraboličen, na spodnji polovici je kapljevina, na zgornjem pa plin. Lokacija medfazne meje je s tem vnaprej znana ( $D = E$ ).



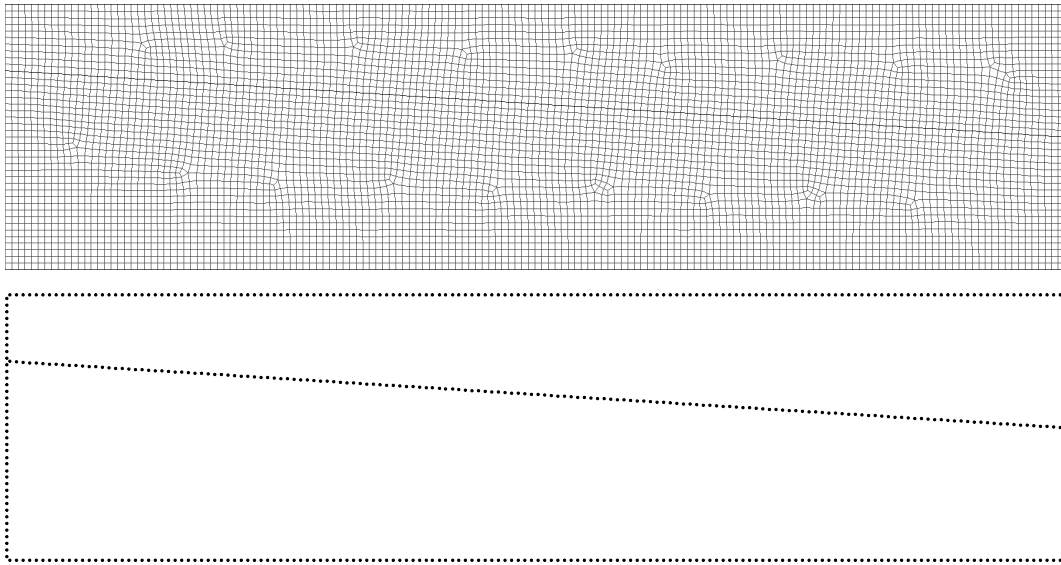
Slika 2: Geometrija 2D kanala z začetno obliko medfazne meje (I).

Robni pogoji so naslednji ( $y \in [0, 1]$ ):

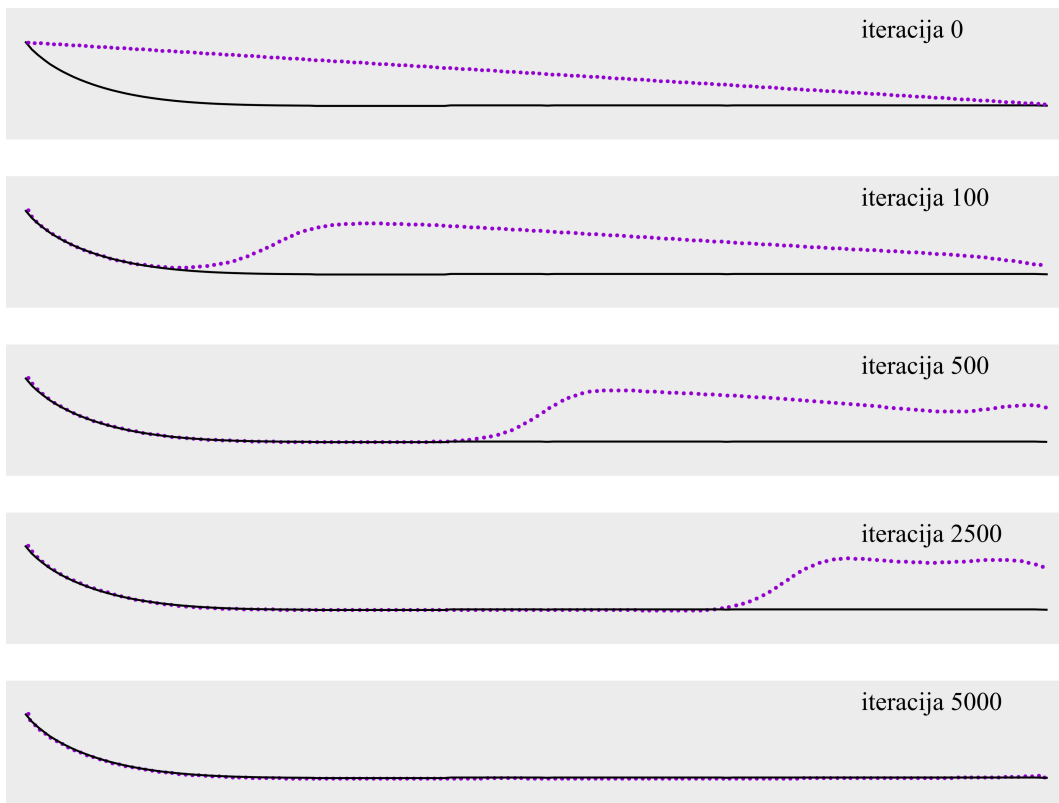
- $A = H/4$ ,  $v_x = 9(-64y^2 + 112y - 48)/2$ ,  $v_y = 0$ ;
- $B = 3H/4$ ,  $v_x = 3(-64y^2 + 48y)/18$ ,  $v_y = 0$ ;
- $C = F = L$ ,  $v_x = v_y = 0$ ;
- $D = E = H/2$ ,  $v_x = 9y(1 - y)$ ,  $v_y = 0$ .

Za ovrednotenje natančnosti MFS rešitve smo uporabili rezultate Fluent izračuna kot referenčno rešitev. Za opis dvofaznega toka smo uporabili VOF model. Programski paket ANSYS Fluent [1] rešuje Navier-Stokesove enačbe. Stokesov tok smo modelirali tako, da smo za gostoto plina in kapljevine uporabili zelo majhno vrednost  $\rho_l = \rho_g = 10^{-40} \text{ kg m}^{-3}$ . Tako je bil prispevek konvektivnega člena zanemarljiv.

Na sliki 3 sta prikazani mreža 6400 četverkotnih celic ( $160 \times 40$ ), ki jo uporabimo pri Fluent izračunu, in 720 kolokacijskih točk pri MFS izračunu. Razmik med robnimi točkami je 0,025 m.

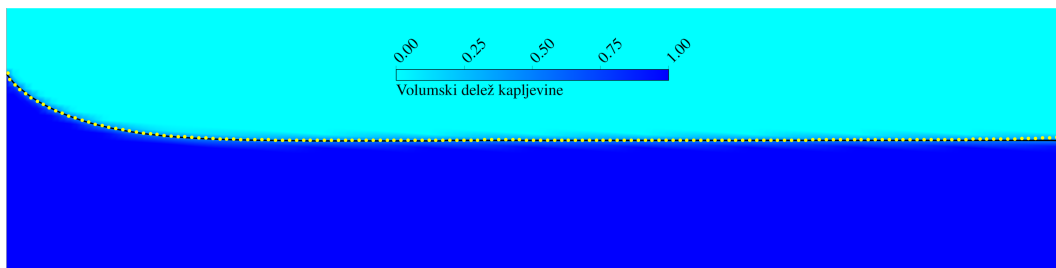


**Slika 3:** Mreža kontrolnih volumnov (zgoraj) in MFS kolokacijske točke (spodaj).  
Na sliki 4 je prikazan razvoj medfazne meje. Vidimo, kako se iz začetne linearne oblike z iteracijami približuje končni obliki.



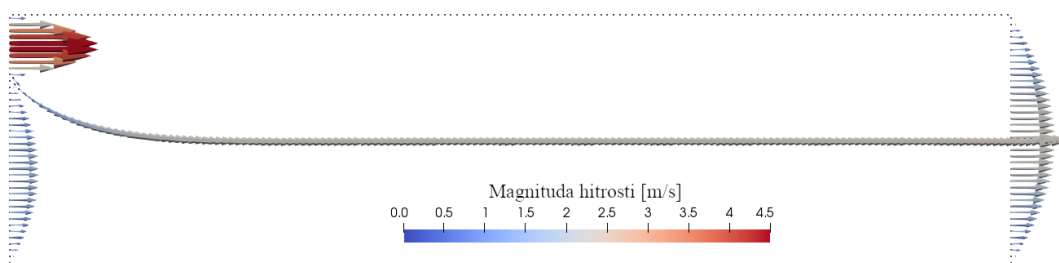
**Slika 4:** Razvoj medfazne meje: — končna oblika, • kolokacijske točke.

Slika 5 prikazuje volumski delež kapljevine in ustaljeno obliko medfazne meje za Fluent izračun, ter končne pozicije kolokacijskih točk medfaznega roba MFS izračuna. Vidimo, da je ujemanje odlično.



**Slika 5:** Volumski delež kapljevine in medfazna meja: — Fluent, ● MFS.

Vektorji hitrosti v kolokacijskih točkah so prikazani na sliki 6. Lepo je razvidno, da je na medfaznem robu normalna komponenta hitrosti nič, kot zahteva ravnotežni pogoj (3)–(5).



**Slika 6:** Hitrost v kolokacijskih točkah.

## 5 Zaključki

Za reševanje problema dvofaznega Stokesovega toka smo uporabili metodo temeljnih rešitev. Kot zgled uporabe tega pristopa smo obravnavali curek kapljevine v vzporednem toku plina v 2D geometriji. Predstavljena metoda je zelo preprosto razširljiva na 2D osno-simetrično in 3D geometrijo, le ustrezno temeljno rešitev je potrebno uporabiti.

Primerjava MFS izračuna z referenčno numerično rešitvijo, dobljeno s komercialno CFD kodo Ansys Fluent, pokaže, da je predstavljena formulacija uspešna pri reševanju problemov dvofaznega Stokesovega toka.

Zaradi računske učinkovitosti metode temeljnih rešitev je ta primerna za izračun šob za fokusiranje toka, ki se uporabljajo v femtosekundni kristalografiji. Zelo hitro lahko določimo debelino curka pri različnih geometrijskih konfiguracijah šob in kombinacijah volumskih pretokov plin–kapljevina.

**Zahvala:** Avtorja se zahvaljujeva podpori DESY, Hamburg, Nemčija v okviru projekta “Innovative Methods for the Imaging with the use of X-ray Free Electron Laser (XFEL) and Synchrotron Sources” ter Javni agenciji za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije (ARRS) v okviru projekta J2-1718 Napredno brez mrežno modeliranje in simulacija večfaznih sistemov in programa P2-0162 Tranzientni dvofazni tokovi.

## Literatura

- [1] ANSYS®. Academic Research CFD, Release 18.2.
- [2] C. Chen, A. Karageorghis, Y.-S. Smyrlis, *The method of fundamental solutions - a meshless method*, 2008.
- [3] C.S. Chen, A. Karageorghis, Y. Li, *On choosing the location of the sources in the MFS*, Num. Algorithms 72, 107–30, 2016.
- [4] D.L. Young S.J. Jane, C.M. Fan, K. Murugesan, C.C. Tsai, *The method of fundamental solutions for 2D and 3D Stokes problems*, J. Comput. Phys. 211, 1–8, 2006.
- [5] G. Tryggvason, R. Scardovelli, S. Zaleski, *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*, Cambridge University Press, 2011.
- [6] H. N. Chapman et al., *Femtosecond X-Ray Protein Nanocrystallography*, Nature 470, 73–78, 2011.
- [7] M.S. Longuet-Higgins, F.R.S Cokelet, E.D. Cokelet, *The deformation of step surface waves on water – I. A numerical method of computation*, Proc. R. Soc. Lond. A. 350, 1–26, 1976.
- [8] R. Zahoor, G. Belšak, S. Bajt, B. Šarler, *Simulation of liquid micro-jet in free expanding high-speed co-flowing gas streams*, Microfluidics and Nanofluidics (Springer Nature) 22, 1–20, 2018.
- [9] R. Zahoor, J. Knoška, S. Bajt, B. Šarler, *Experimental and numerical investigation of gas-focused liquid micro-jet velocity*, Int. J. Multiph. Flow 135, 1–13, 2021.
- [10] W. Kaufmann, *Fluid Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1963.
- [11] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teucolsky, W.T. Wetterling, *Numerical Recipes in FORTRAN 77: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 1992.
- [12] Z. Rek, B. Šarler, *The method of fundamental solutions for the Stokes flow with the sub-domain technique*, Eng. Anal. Bound. Elem. 128, 80–89, 2021.



## *Parametrični model za napoved sil in momentov na superelipsoidne delce v Stokesovem toku*

Mitja Štrakl<sup>1</sup>, Jana Wedel<sup>2</sup>, Matjaž Hriberšek<sup>1</sup>, Paul Steinmann<sup>2,3</sup> in Jure Ravnik<sup>1</sup>

## *Parametric force and torque model for superellipsoidal particles in Stokes flow*

**Povzetek.** Predstavljamo model za napoved sil in momentov na superelipsoidne delce. Model temelji na opravljeni parametrični študiji v obliki številnih numeričnih eksperimentov obtakanja delca v Stokesovem toku. Zbrani podatki so podani v obliki tenzorjev translacijskega, rotacijskega in deformacijskega upora in služijo kot osnova za vpeljavo parametričnega modela. Delovanje modela je preizkušeno na petih primerih delcev tipičnih oblik, kjer je vključena tudi primerjava z ostalimi obstoječimi modeli. Končni rezultat pokaže, da predstavljen model ponuja bistveno izboljšanje natančnosti napovedi za ne-sferične delce. Še ena ključna prednost modela je napoved sil in momentov, kar je potrebno za celoviti opis dinamike delca v toku. Na koncu je delovanje modela še prikazano na primeru realnega prašnega delca.

**Abstract.** We present the force and the torque prediction model for superellipsoidal particles. The model is based on conducting the numerical parametric study of relative flow around a superellipsoidal particle, in the Stokes flow. Data is collected in the form of translation, rotation and deformation resistance tensors. The parametric model is derived, based on that data. The model is evaluated for its accuracy, where comparison with other common models is also included. It is established that the presented model benefits from significantly improved prediction accuracy for non-spherical particles. Another key advantage of the model is the prediction of both, the force and the torque, which is required to achieve the comprehensive description of particle dynamics. In the end, the model application is demonstrated on the realistic pollen particle example.

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

<sup>2</sup> Institute of Applied Mechanics, Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

<sup>3</sup> Glasgow Computational Engineering Centre, University of Glasgow

## 1 Uvod

Večfazni tokovi z delci so v zadnjem času pogosto predmet obravnave številnih raziskav [13], [14]. Z razvojem numeričnih metod in naraščanjem zmogljivosti strojne opreme, postajajo obravnavani problemi vedno bolj obširni, s kompleksnim tokom nosilne faze in velikim številom delcev različnih oblik. Pri tem se pogosto uporablja Euler-Lagrangev pristop, s predpostavko o točkah delcih, kjer je interakcija med delci in nosilno fazo modelirana. Formulacija modela interakcije je v veliki meri odvisna od oblike delcev, kar je tudi glavna omejitev večine obstoječih modelov. Še vedno so zelo aktualni analitični modeli upora v Stokesovem toku, za sfere [10] ali sferoide [9]. Za delce kompleksnejših oblik se po navadi uporabljajo modeli, ki temeljijo na eksperimentalnih rezultatih, kot npr. modeli posplošenih oblik [3], [7] in [5]. Za celovito napoved dinamike ne-sferičnega delca je potrebno zraven sile določiti tudi momente, ki delujejo na delec, kot npr. Jefferyev [6] model za napoved momentov na sferoide. Kljub širokem naboru obstoječih modelov, pa v raziskovalni sferi še vedno obstaja težnja po izboljšavi teh modelov, bodisi v smeri vključevanja dodatnih oblik delcev, ali pa v smeri bolj natančne napovedi. V nadaljevanju je predstavljen nov model za napoved sil in momentov na superelipsoide v Stokesovem toku. S pomočjo superelipsodine parametrizacije, kot aproksimacija oblike delca, model ponuja bistveno razširitev nabora možnih oblik, napram ostalim modelom. Vključuje napoved sil in momentov, kar pomeni, da je s tem možno obravnavati tako translacijo kot tudi rotacijo delca v toku.

## 2 Obtekanje delca

Ob upoštevanju omejitev, postavljenih v uvodnem poglavju, se izkaže, da je predmet obravnave stacionarni tok Newtonske tekočine gostote  $\rho_f$ , pri zelo nizkem Reynoldsovem številu delca  $Re_p = \|\vec{u}\|_2 d_p / \nu \ll 1$ , kjer je  $d_p$  premer delca,  $\|\vec{u}\|_2$  velikost hitrosti relativnega toka,  $\nu$  pa kinematična viskoznost. Iz tega sledi, da je tovrstni tok možno opisati s poenostavljeno obliko Navier-Stokesovih enačb  $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$  in  $-\vec{\nabla} p + \mu \nabla^2 \vec{u} = 0$ , kjer je,  $\mu = \nu \rho_f$ , in  $p$  statični tlak. Za aproksimacijo oblike delca je uporabljena enačba površine superelipsoida

$$S(x, y, z) = \left[ \left( \frac{x}{a} \right)^{2/e_2} + \left( \frac{y}{b} \right)^{2/e_2} \right]^{e_2/e_1} + \left( \frac{z}{c} \right)^{2/e_1}. \quad (1)$$

Volumen delca je fiksiran na  $V = \pi/6$  (volumen enotske sfere), posledično pa je njegova najkrajša os  $c = \left[ \frac{\pi}{12\lambda_1\lambda_2 B(e_1/2+1, e_1) B(e_2/2, e_2/2)} \right]^{1/3}$ . Pri tem je  $B(\bullet)$  beta funkcija, osni razmerji  $\lambda_1 = a/c$  in  $\lambda_2 = b/c$  pa definirata dolžine dveh daljših osi. Zaradi relativnega obtekanja delca nanj deluje sila toka

$$\vec{F} = \int_{\Gamma} \vec{q} d\Gamma = \pi \mu c \underline{K} \cdot \vec{u}, \quad (2)$$

kjer člen  $\vec{q} = \underline{\sigma} \cdot \vec{n}$  predstavlja fluks gibalne količine na površini delca,  $\vec{u}$  in  $\underline{K}$  pa sta hitrost in tenzor translacijskega upora, v koordinatnem sistemu delca. V primeru toka, z ne-ničelnim hitrostnim gradientom, na delec deluje tudi moment

$$\vec{T} = \int_{\Gamma} \vec{r} \times \vec{q} d\Gamma = \mu \pi c^3 \left[ \underline{\Pi} \cdot \begin{bmatrix} f \\ g \\ h \end{bmatrix} + \underline{\Omega} \cdot \begin{bmatrix} \xi - \omega_x \\ \eta - \omega_y \\ \chi - \omega_z \end{bmatrix} \right], \quad (3)$$



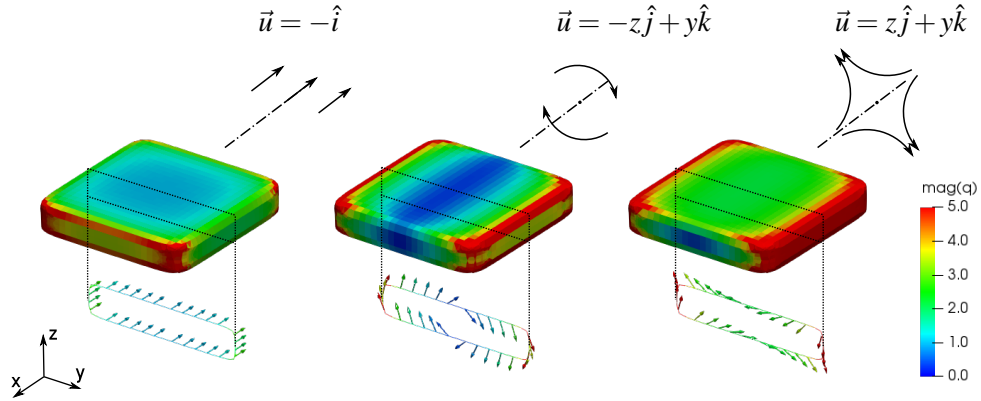
kjer so  $f, g, h$  in  $\xi, \eta, \chi$  komponente hitrostnega gradienta,  $\vec{\omega}$  kotna hitrost delca,  $\underline{\Pi}$  in  $\underline{\Omega}$  pa tenzorja rotacijskega in deformacijskega upora. V splošnem so komponente tenzorjev  $\underline{K}$ ,  $\underline{\Omega}$ ,  $\underline{\Pi}$  funkcija oblike površine delca in njegove orientacije glede na tok. Z upoštevanjem Lorentzovega teorema vzajemnosti [4] se izkaže, da so tenzorji simetrični, posledično pa torej obstajajo glavne osi delca, kjer so neničelne samo diagonalne komponente. Te glavne osi ležijo v smereh simetrijskih ravnin delca, zato je v primeru obravnave čiste translacije v teh smereh, neničelna samo ena diagonalna komponenta tenzorja translacijskega upora  $\underline{K}$ . Analogno velja tudi za komponente  $\underline{\Omega}$  in  $\underline{\Pi}$  tenzorja, če 2D rotacijski oz. strižni tok leži pravokotno na simetrijske ravnine. S tem je definiranih 9 tokovnih polj, ki s posamičnimi prispevki v celoti opišejo silo in moment toka, ki deluje na delec. Določitev sile in momenta v poljubni orientaciji delca (torej v poljubnem koordinatnem sistemu) je možna z uporabo splošnega formalizma za rotacijo tenzorjev  $\underline{\tilde{K}} = \underline{R}^T \underline{K} \underline{R}$ , kjer je  $\underline{\tilde{K}}$  tenzor translacijskega upora v eulerjevem koordinatnem sistemu,  $\underline{R}$  pa rotacijska matrika, ki predstavlja relativno orientacijo delca glede na eulerjev koordinatni sistem.

### 3 Numerični model

Superelipsoidni delec je postavljen v središče trodimenzionalne računske domene, v obliki sfere. Zaradi difuzivnosti Stokesovega toka je potreben zelo velik odmik od delca, da perturbacije hitrosti več niso zaznavne. To je potrebno upoštevati pri določitvi velikosti računske domene, da je numerična rešitev neodvisna od vpliva robnega pogoja na mejah domene. Avtorji, ki so obravnavali podobne primere, [1], [12] poročajo o primerni velikosti domene, ki se giblje v območju  $20d_p$  pa vse do  $200d_p$ . Reševanje numeričnega problema poteka z metodo robnih elementov (BEM) [11]. Ena od prednosti te metode je to, da velikost domene bistveno ne vpliva na računsko zahtevnost problema, saj volumska diskretizacija domene ni potrebna. Iz tega razloga je izbrana velikost sferične domene  $1024d_p$ , pri čemer je ocenjen vpliv domene na numerično rešitev velikostnega razreda 0.1% (jakost perturbacije pri analitični rešitvi za tok okoli sfere izginja z  $1/r$ ). Robni pogoj, postavljen na mejni površini domene, je stacionarno hitrostno polje iz nabora treh translacij, treh rotacij in treh strižnih polj, kot kaže slika 1. Za določitev tenzorja translacijskega upora  $\underline{K}$  se obravnava hitrostno polje  $\vec{u} = -\hat{i}$  (slika 1, levo), vzdolž vsake izmed glavnih osi. Pri tem so  $(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k})$  enotski vektorji koordinatnega sistema delca. Podobno se za določitev tenzorja rotacijskega upora  $\underline{\Omega}$  obravnava hitrostno polje  $\vec{u} = -z\hat{j} + y\hat{k}$  (slika 1, sredina), za tenzor deformacijskega upora  $\underline{\Pi}$  pa  $\vec{u} = z\hat{j} + y\hat{k}$  (slika 1, desno). Na površini delca je predpisan pogoj brez zdrsa hitrosti. Delec in meje računske domene so diskretizirani s površinsko računsko mrežo. Po končani študiji različnih resolucij diskretizacije, je bila izbrana mreža s prb.  $1.6 \cdot 10^4$  trikotnih robnih elementov, po katerih je funkcija interpolirana linearno, fluks pa konstantno.

### 4 Parametrični model upora

Za potrebe oblikovanja parametričnega modela  $\underline{K}$ ,  $\underline{\Omega}$  in  $\underline{\Pi}$  tenzorjev je načrtovan nabor numeričnih eksperimentov. Vrednosti tenzorjev so izračunane za približno  $5.4 \cdot 10^3$  superelipsoidov, v območju parametrov:  $\lambda_1 = [1, 11]$ ,  $\lambda_2 = [1, 11]$ ,  $e_1 = [0.2, 1.8]$  in  $e_2 = [0.2, 1.8]$ . Parametrični model je oblikovan na podlagi polinomske aproksimacijske sheme. Glede na širok



**Slika 1:** Velikost napetosti  $\|\vec{q}\|_2$  na površini superelipsoida, v obliki kvadra. Prikazana so hitrostna polja translacije (levo), rotacije (sredina) in strižnega toka (desno).

razpon grobih vrednosti je najučinkoviteje izvesti posamične aproksimacije, za vsako komponento tenzorja posebjaj. Aproksimacijski polinom ene spremenljivke ima obliko  $p_m(x) = [1 \ x \ x^2 \ \dots \ x^m]^T$ , kjer je  $m$  red polinoma. V splošnem je aproksimacijska shema nelinearna funkcija štirih spremenljivk  $f(\lambda_1, \lambda_2, e_1, e_2)$ , ki ima sledečo obliko:

$$f(\lambda_1, \lambda_2, e_1, e_2) = p_{3,3}(\lambda_1, \lambda_2)^T \underline{A} p_{2,2}(e_1, e_2) = A_{16,9} \lambda_1^3 \lambda_2^3 e_1^2 e_2^2 + A_{16,8} \lambda_1^3 \lambda_2^3 e_1^2 e_2 + \dots + A_{1,2} e_2 + A_{1,1}. \quad (4)$$

Pri tem je  $p_{3,3}(\lambda_1, \lambda_2) = \text{vec} \left( [p_3(\lambda_1) p_3(\lambda_2)^T]^T \right)$  tenzorski produkt polinomov tretjega reda  $p_3(\lambda_1)$  in  $p_3(\lambda_2)$ , ki je vektoriziran nazaj v vektorski zapis. Analogno velja za  $p_{2,2}(e_1, e_2) = \text{vec} \left( [p_2(e_1) p_2(e_2)^T]^T \right)$ , ki je tenzorski produkt polinomov drugega reda  $p_2(e_1)$  in  $p_2(e_2)$ . Matrika koeficientov  $\underline{A}$  pa je neznan del aproksimacijske sheme, ki zajema informacijo o vrednosti komponent  $\underline{K}$ ,  $\underline{\Omega}$  in  $\underline{\Pi}$  tenzorjev, glede na obliko delca. Matrika  $\underline{A}$  se določi z reševanjem optimizacijskega problema, na podlagi enačbe 4, in sicer

$$\min_{\underline{A}} \sum_{i=1}^n \left[ \frac{f_i(\lambda_1, \lambda_2, e_1, e_2) - y_i}{y_i} \right]^2, \quad (5)$$

kjer je  $f_i(\lambda_1, \lambda_2, e_1, e_2)$  aproksimacija posamezne komponente tenzorja, za  $i$ -ti delec,  $y_i$  njena dejanska vrednost,  $n$  pa je število delcev iz parametrične študije. Zgornji problem se reši posamično za vsako komponento tenzorjev  $\underline{K}$ ,  $\underline{\Omega}$  in  $\underline{\Pi}$ , pri čemer je uporabljen programski paket GEKKO optimization suite [2]. Zaradi visoke standardne deviacije v numeričnih rezultatih, se pri aproksimaciji celotnega obsega delcev pojavi relativno visoko odstopanje aproksimacije napram pravim vrednostim. Za minimizacijo tega problema je bil obseg delcev iz parametrične študije razdeljen na dva intervala, in sicer na interval  $\mathcal{R}_1$  za delce z  $\lambda_1 \leq 5$  in interval  $\mathcal{R}_2$  za delce z  $\lambda_1 > 5$ . Primer matrike koeficientov  $\underline{A}^1$ , določene na intervalu  $\mathcal{R}_2$ , za komponento  $K_{zz}$

<sup>1</sup> Celoten model, skupaj z matrikami  $\underline{A}$  za vse komponente tenzorjev je na voljo na: <https://github.com/transport-phenomena/superellipsoid-force-torque-model>

je

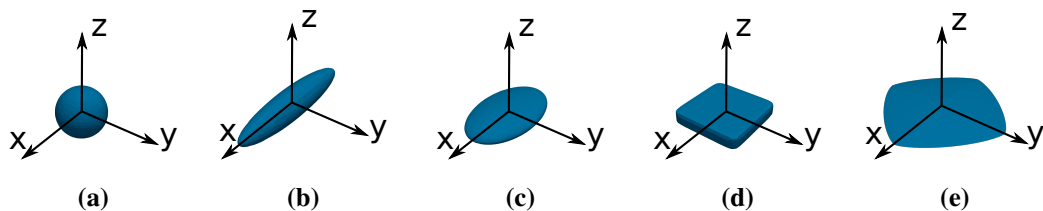
$$\underline{A}_{\mathcal{B}_2}(K_{xx}) = \begin{bmatrix} -1.490 & 2.399 & 0.1400 & 6.755 & 1.714 & -4.288 & -3.356 & -1.606 & 2.604 \\ 9.752 & -6.779 & 0.6789 & -11.02 & 3.714 & 3.013 & 4.401 & -0.1966 & -2.298 \\ -2.572 & 2.880 & -0.5147 & 4.044 & -3.221 & 0.0292 & -1.695 & 1.094 & 0.2095 \\ 0.2896 & -0.3609 & 0.0886 & -0.4715 & 0.5215 & -0.1110 & 0.2014 & -0.2032 & 0.0309 \\ 3.211 & -0.7074 & -0.1795 & -2.646 & -1.628 & 2.086 & 1.103 & 0.9978 & -1.163 \\ -1.809 & 1.585 & -0.0625 & 3.202 & -0.0264 & -1.704 & -1.333 & -0.4379 & 1.079 \\ 0.7137 & -0.8092 & 0.1274 & -1.243 & 0.7535 & 0.1736 & 0.5319 & -0.2375 & -0.1487 \\ -0.0865 & 0.1093 & -0.0262 & 0.1498 & -0.1515 & 0.0241 & -0.0649 & 0.0592 & -0.0049 \\ -0.2177 & 0.0251 & 0.0452 & 0.2431 & 0.3170 & -0.3082 & -0.1068 & -0.1687 & 0.1619 \\ 0.1998 & -0.1364 & -0.0154 & -0.3142 & -0.1293 & 0.2639 & 0.1325 & 0.1045 & -0.1523 \\ -0.0733 & 0.0765 & -0.0085 & 0.1255 & -0.0479 & -0.0387 & -0.0542 & 0.0119 & 0.0246 \\ 0.0090 & -0.0110 & 0.0025 & -0.0156 & 0.0142 & -0.0013 & 0.0068 & -0.0055 & 0.0 \\ 0.0073 & 0.0011 & -0.0027 & -0.0072 & -0.0171 & 0.0142 & 0.0032 & 0.0085 & -0.0072 \\ -0.0070 & 0.0033 & 0.0015 & 0.0099 & 0.0098 & -0.0124 & -0.0042 & -0.0060 & 0.0068 \\ 0.0025 & -0.0023 & 0.0 & -0.0041 & 0.0004 & 0.0021 & 0.0018 & 0.0 & -0.0012 \\ -0.0003 & 0.0004 & 0.0 & 0.0005 & -0.0004 & 0.0 & -0.0002 & 0.0002 & 0.0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

Ujemanje aproksimacije s pravimi vrednostimi je ovrednoteno z vpeljanim izrazom za modificirano relativno napako  $\varepsilon(K_{zz}) = \frac{|K_{zz}^* - K'_{zz}|}{\|K'\|_F}$ , kjer je  $\varepsilon$  modificirana relativna napaka,  $K_{zz}^*$  rezultat aproksimacije komponente tenzorja delca,  $K'_{zz}$  numerično izračunana prava vrednost komponente tenzorja,  $\|K'\|_F$  pa Frobeniusova norma numerično izračunanega tenzorja. Končne vrednosti posameznih modificiranih relativnih napak, podane v obliki povprečja za celotni tenzor znašajo  $\bar{\varepsilon}(K) = 0.11\%$ ,  $\bar{\varepsilon}(\Omega) = 0.28\%$  in  $\bar{\varepsilon}(\Pi) = 0.31\%$ .

## 5 Rezultati

### 5.1 Primerjava s podobnimi modeli

Predstavljen model upora je preizkušen na petih primerih ne-sferičnih delcev, različnih oblik, ki jih pogosto zasledimo v inženirskih problemih. Delci so aproksimirani s parametrično enačbo superelipsoida 1 in so prikazani na sliki 2. Za vsakega izmed delcev se določijo vrednosti vseh



**Slika 2:** Primeri ne-sferični delcev, uporabljeni za preizkušanje parametričnega modela upora v Stokesovem toku; a) sferični delec z  $\lambda_1 = 1$ , b) sferoid z osnim razmerjem  $\lambda_1 = 5$ , c) elipsoid z osnima razmerjima  $\lambda_1 = 5$  in  $\lambda_2 = 3$ , d) pravokotni superelipsoid z  $\lambda_1 = \lambda_2 = 5$  in  $e_1 = e_2 = 0.2$  in e) superelipsoid piramidne oblike z  $\lambda_1 = \lambda_2 = 10$  in  $e_1 = e_2 = 1.5$ .

komponent  $\underline{K}$ ,  $\underline{\Omega}$  in  $\underline{\Pi}$  tenzorjev z uporabo parametričnega modela upora. V prvem koraku je izvedena primerjava vseh rezultatov s pravimi numeričnimi rezultati. Zraven tega pa je izvedena tudi parametrična študija, kjer so rezultati primerjani z ostalimi modeli upora, ki so trenutno aktualni na tem področju. Med te modele spadajo analitični modeli upora v Stokesovem toku za

sferični delec in sferoid [10, 9, 6], ter trije modeli posplošenih oblik avtorjev Haider & Levenspiel [3], Leith [7] in Holzer & Sommerfeld [5]. Slednji trije modeli služijo samo za napoved translacijskega upora, ne zajemajo pa vpliva rotacije delca. Rezultati v obliki modificirane relativne napake so prikazani v Tabelah 1 - 3. Kot referenčne vrednosti so uporabljeni analitični (delca a in b) oz. numerični rezultati (delci c, d in e).

**Tabela 1:** Modificirana relativna napaka pri napovedi  $\underline{K}$  tenzorja z različnimi modeli upora, za primere delcev na sliki 2a-2e.

Delec	Stokes [10]	Oberbeck [9]	Hai. & Lev. [3]	Leith [7]	Hol. & Som. [5]	Štrakl et. al
a	0.0%	0.0%	0.44%	1.34%	1.28%	0.03%
b	30.95%	0.0%	11.04%	7.44%	7.17%	0.05%
c	37.91%	15.08%	8.00%	4.00%	3.78%	0.02%
d	44.54%	29.44%	9.48%	5.72%	2.69%	0.17%
e	47.62%	25.16%	10.93%	4.08%	5.47%	0.11%

**Tabela 2:** Modificirana relativna napaka pri napovedi  $\underline{\Omega}$  tenzorja z različnimi modeli upora, za primere delcev na sliki 2a-2e.

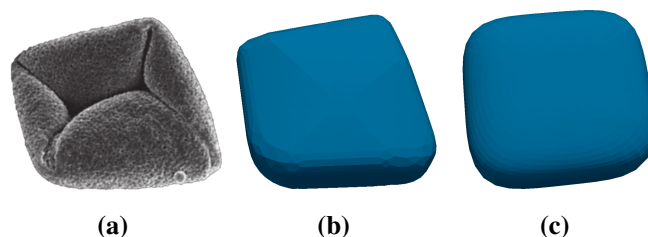
**Tabela 3:** Modificirana relativna napaka pri napovedi  $\underline{\Pi}$  tenzorja z različnimi modeli upora, za primere delcev na sliki 2a-2e.

Delec	Stokes [10]	Jeffery [6]	Štrakl et. al	Delec	Stokes [10]	Jeffery [6]	Štrakl et. al
a	0.0%	0.0%	0.18%	a	-	-	-
b	47.41%	0.0%	0.19%	b	47.14%	0.0%	0.11%
c	53.83%	26.89%	0.06%	c	53.54%	26.20%	0.11%
d	56.71%	48.40%	0.14%	d	47.14%	47.14%	0.23%
e	57.51%	40.91%	0.50%	e	47.15%	47.13%	0.49%

Kot je razvidno iz Tabel 1 - 3 se napoved parametričnega modela upora zelo dobro ujema z referenčnimi vrednostmi. To potrjuje tudi velikost relativne napake, ki je najnižja med vsemi primerjanimi modeli in se giblje v območju 0.03 – 0.5%.

## 5.2 Primer realnega delca

Aplikativnost predstavljenega modela je prikazana na primeru realnega prašnega delca [8]. Referenčni podatki za delec so izračunani z uporabo enakega numeričnega modela, kot celotna parametrična študija. Pripravljena je trodimenzionalna rekonstrukcija površine delca iz posnetkov, za katero so numerično izračunane vse komponente tenzorjev upora, ki služijo kot referenčni rezultati. Superelipsoid, ki se najbolje prilega rekonstruirani površini je določen s pomočjo optimizacijskega problema, kjer se minimizira ciljna funkcija  $[S(x,y,z) - 1]^2$ . V Tabeli 4 so prikazane relativne napake pri napovedi posameznih tenzorjev na primeru prašnega delca. Opažanja so podobna, kot pri ostalih delcih, kjer je razvidno da so napovedi predstavljenega modela z najmanjšo napako. Občutna razlika je opazna predvsem pri napovedi tenzorjev



**Slika 3:** Prikazan je posnetek realnega delca [8] (a), trodimenzionalna rekonstrukcija površine (b) in aproksimirani superelipsoid (c) s parametri:  $\lambda_1 = 1.96$ ,  $\lambda_2 = 1.83$ ,  $e_1 = 0.564$ ,  $e_2 = 0.472$ .

rotacijskega ( $\underline{\Omega}$ ) in deformacijskega upora ( $\underline{\Pi}$ ). V slednjih dveh primerih je med obstoječimi modeli možna napoved samo z analitičnim modelom za sfero ali sferoid, kar pa za delec tako kompleksne oblike ne zagotavlja natančnih rezultatov. Končne velikosti modificirane relativne napake, pri napovedi s predstavljenim modelom upora, se gibljejo v območju 1 – 2%.

**Tabela 4:** Modificirana relativna napaka na primeru prašenga delca, za različne modele upora.

Tenzor	St. [10]	Ob./Jef. [9]/[6]	Ha.&Le. [3]	Le. [7]	Ho.&Som. [5]	Štrakl et. al
$\underline{K}$	26.76%	17.24%	8.70%	7.68%	5.56%	0.74%
$\underline{\Omega}$	49.00%	36.77%	-	-	-	1.60%
$\underline{\Pi}$	47.90%	46.34%	-	-	-	2.36%

## 6 Zaključek

Predstavljen je parametrični numerični model za obravnavo sil na superelipsoidne delce v Stokesovem toku. S pomočjo tega je izvedena parametrična študija, ki je osnova za izpeljavo predstavljenega parametričnega modela upora. Ta je preizkušen na petih primerih tipičnih oblik delcev, kjer je v obliki modificirane relativne napake ponazorjeno ujemanje modela z referenčnimi vrednostmi. Izvedena je tudi primerjava z ostalimi modeli. Na koncu je predstavljena tudi aplikacija modela na primeru realnega prašnega delca. Zraven izboljšane natančnosti napovedi sil na delce, je ena od bistvenih prednosti predstavljenega modela tudi pokrivanje širokega nabora oblik ne-sferičnih delcev. To je tudi prvi avtorjem znani model te vrste, ki vključuje napoved upora pri translacijskem in rotacijskem gibanju, za tako širok nabor oblik delcev. S je pričakovan tudi pomemben doprinos k vsem raziskavam te vrste, saj predstavljen model omogoča celovito obravnavo bistveno širšega nabora oblik delcev, kot obstoječi modeli.

## Literatura

- [1] H. I. Andersson and F. Jiang. Forces and torques on a prolate spheroid: low-Reynolds-number and attack angle effects. *Acta Mechanica*, 230(2):431–447, feb 2019.

- [2] L. Beal, D. Hill, R. Martin, and J. Hedengren. Gekko optimization suite. *Processes*, 6(8):106, 2018.
- [3] A. Haider and O. Levenspiel. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. *Powder Technology*, 58(1):63–70, 1989.
- [4] J. Happel and H. Brenner. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Martinus Nijhoff Publishers, Kluwer, The Hague, Netherlands, 1983.
- [5] A. Hölzer and M. Sommerfeld. New simple correlation formula for the drag coefficient of non-spherical particles. *Powder Technology*, 184(3):361–365, 2008.
- [6] G. B. Jeffery. The motion of ellipsoidal particles immersed in a viscous fluid. *Proc. R. Soc. A*, 102:161–179, 1922.
- [7] D. Leith. Drag on nonspherical objects. *Aerosol Science and Technology*, 6(2):153–161, 1987.
- [8] A. Matamoro-Vidal, C. Prieu, C. A. Furness, B. Albert, and P. H. Gouyon. Evolutionary stasis in pollen morphogenesis due to natural selection. *The New phytologist*, 209(1):376–394, jan 2016.
- [9] A. Oberbeck. Ueber stationäre flüssigkeitsbewegungen mit berücksichtigung der inneren reibung. *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, 1876(81):62–80, 1876.
- [10] G. G. Stokes. On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums. *Trans. Cambridge Phil. Soc.*, 9:8, 1851.
- [11] M. Štrakl, M. Hriberšek, J. Wedel, P. Steinmann, and J. Ravnik. A Model for Translation and Rotation Resistance Tensors for Superellipsoidal Particles in Stokes Flow. *Journal of Marine Science and Engineering* 2022, Vol. 10, Page 369, 10(3):369, mar 2022.
- [12] M. Štrakl, J. Wedel, P. Steinmann, M. Hriberšek, and J. Ravnik. Numerical drag and lift prediction framework for superellipsoidal particles in multiphase flows. *International Journal of Computational Methods and Experimental Measurements*, 10(1):38–49, jan 2022.
- [13] J. Wedel, P. Steinmann, M. Štrakl, M. Hriberšek, and J. Ravnik. Can CFD establish a connection to a milder COVID-19 disease in younger people ? Aerosol deposition in lungs of different age groups based on Lagrangian particle tracking in turbulent flow. *Computational Mechanics*, 2021.
- [14] J. Wedel, P. Steinmann, M. Štrakl, M. Hriberšek, and J. Ravnik. Risk Assessment of Infection by Airborne Droplets and Aerosols at Different Levels of Cardiovascular Activity. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 28(6):4297–4316, 2021.



## *Damping identification with high speed camera*

Ivan Tomac<sup>1,2</sup>, Janko Slavič<sup>1</sup>

### *Identifikacija dušenja z uporabo hitre kamere*

**Abstract.** High-speed cameras have the advantage over classical measuring techniques that measurements can be obtained from a distance, without having any contact with the structure and provide a full-field response. The latter advantage is utilized to reduce uncertainty of identified damping. Due to the high level of noise a Morlet-wave damping identification method is used. It has the advantages of the continuous wavelet transform, that are: a relatively good frequency separation and a high resistance to noise, but it is significantly faster and simpler. The full-field damping identification results were averaged with regard to the identified deflection shapes. The method was tested experimentally on the simple structure up to 2.5 kHz. It was found that the results are comparably accurate to the damping identified using the high-dynamic-range and low-noise piezoelectric accelerometer, proving that damping can be accurately identified from high-speed-camera measurements, only.

**Povzetek.** Hitrotekoče kamere imajo, v primerjavi s klasičnimi zaznavali, več prednost: omogočajo brezdotično merjenje, merjenje je lahko iz velikih razdalj, omogočajo prostorsko gosto meritev. Prostorska predločenost se lahko uporabi za zmanjšanje merilnega šuma, kar je še posebej pomembno pri identifikaciji dušenja.

Ta raziskava temelji na meritvah pomika, ki so zaznani s hitrotekočo kamero; podatke nato obdelamo z metodo za identifikacijo dušenja, ki temelji na Morletovem valčku. Metoda Morletovega valčka ima podobne lastnosti za identifikacijo dušenja, kakor jih ima zvezna valčna transformacija, vendar je bistveno hitrejša in nima robnega efekta, kateri pokvari identifikacijo na robovih signala.

Rezultati identifikacije dušenja polnega polja so bili povprečni z utežjo, ki sledi lasni obliki analizirane lastne frekvence. Metoda je bila eksperimentalno preizkušena na strukturi z lastnimi frekvencami do 2,5 kHz. Ugotovljeno je bilo, da so rezultati temelječi na hitrotekoči kameri po natančnosti primerljivi tistim, ki temeljijo na zaznavalu z velikim dinamičnim razponom (piezoelektrični merilnik pospeška).

---

<sup>1</sup> University of Ljubljana, Faculty of mechanical engineering

<sup>2</sup> University of Split, Faculty of electrical engineering, mechanical engineering and naval architecture

## 1 Introduction

High-speed cameras are seeing increasing use in the field of structural dynamics [5, 7], where they provide contact-less measurements of displacements with a high spatial resolution. Theoretically, each pixel can be a sensor enabling a full-field measurement [3, 2]. One of the advantages is that high-speed camera measurements offer a full-field response from a distant object [1]. Non-contact and distant monitoring make possible applications that are not possible or hard to perform with conventional approaches.

This paper presents a short version of the research performed by Tomac and Slavič and published in [11]. The focus of this research is to overcome the relatively noisy measurements obtained with high-speed cameras using the over-determination this full-field measurement provides. At the same time, the damping-identification uncertainty is spatially dependent (higher at the nodes). The damping identification is based on the Morlet-Wave Damping Identification (MWDI) method [8], which was previously shown to have the advantages of the continuous wavelet transform method (CWT), *e.g.*, identification on short signals, resistance to noise, good frequency separation, [10, 9]; however, MWDI is numerically significantly less demanding [8, 12]. To verify the accuracy of the identified damping ratios from the high-speed camera data, results are compared the damping ratios identified from the high dynamic range sensor.

## 2 Theoretical background

The basics theory on identification of damping with Morlet-Wave Damping Identification (MWDI) method [8] and the Extended MWDI method [12] is described in this section.

### 2.1 MWDI method

MWDI is based on a finite integral, which is obtained for each mode at one time-frequency point:

$$I(n, k, \omega) = \int_0^T f_m(t) \psi^*(n, k, \omega, t) dt, \quad (1)$$

where  $f_m(t)$  is a damped response of a SDOF system that is described with the frequency of oscillation  $\omega$ , the amplitude of oscillation  $X$ , phase  $\phi$  and damping ratio  $\delta$ . The time length of the analyzed mode  $T$  is due to spectral-leakage reasons, defined by the number of oscillations  $k$  ( $k \in \mathbb{N}$ ) at the analyzed frequency  $\omega$ :  $T = 2\pi k/\omega$ ;  $*$  is the complex conjugate and  $\psi$  is a Morlet wavelet function [4] expressed with parameters  $n, k, \omega$ . The unknown amplitude  $X$  can be reduced, by obtaining the integral  $I$  at two different values of the time-spread parameter  $n$ :

$$\tilde{M}(n_1, n_2, k, \omega) = \frac{|I(n_1, k, \omega)|}{|I(n_2, k, \omega)|}, \quad (2)$$

The ratio  $\tilde{M}$  can be obtained from a measurement, but for a SDOF-free response, it can also be defined analytically. If the Eq. (1) is inserted into Eq. (2) and the SDOF-free response is expressed as  $f_m(t) = X \exp(-\delta\omega t) \cos(\omega t - \phi)$ , the ratio is expressed analytically as [8]:

$$M(n_1, n_2, k_i, \delta_i) = \exp\left(4\pi^2 k_i^2 \delta_i^2 \frac{n_2^2 - n_1^2}{n_1^2 n_2^2}\right) \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} G(n_1, n_2, k_i, \delta_i) \quad (3)$$



where  $\delta_i$  is the damping ratio of the  $i$ -th mode and  $G$  is based on the error functions, see [8]. Damping is identified by solving the equation:

$$\tilde{M}(n_1, n_2, k_i, \omega_i) - M(n_1, n_2, k_i, \delta_i) = 0 \quad (4)$$

for the unknown  $\delta_i$ . Details on selection of parameters  $n_{1,2}$  and  $k$  readers should refer to [11, 8].

## 2.2 eMWDI method

The extended MWDI method presents an optimization approach to the parameters' selection to achieve a convergent result. The method is originally established for identification of damping from a single measurement point in the whole range of feasible parameters  $k$  and  $n_2$ . The parameter  $n_1$  is set constant,  $n_2 = \{n_2 \in \mathbb{N} : n_1 < n_2 \leq 2n_1\}$  and  $k$  is set in range too,  $k_{lo} \leq k \leq k_{hi}$ . The optimization procedure is consisted of searching for  $k$  value that has minimal variation of identified damping for different  $n_2$  values. For details, see [12].

In this research extended MWDI is used in the search for parameter  $k \in \mathbb{N}$  between small set of the spatial points that has the highest PSD value for the fixed  $n_2$  parameter. The  $k_i$  parameter corresponding to a particular mode  $i$  is selected by searching for the minimum standard deviation of the damping  $\delta_{i,l}(k)$  between selected spatial locations  $l$ :

$$k_i = \arg \min_k \left\{ \text{std dev}_l \{ \delta_{i,l}(k) \} \right\} \quad (5)$$

## 3 Spatially weighted MWDI

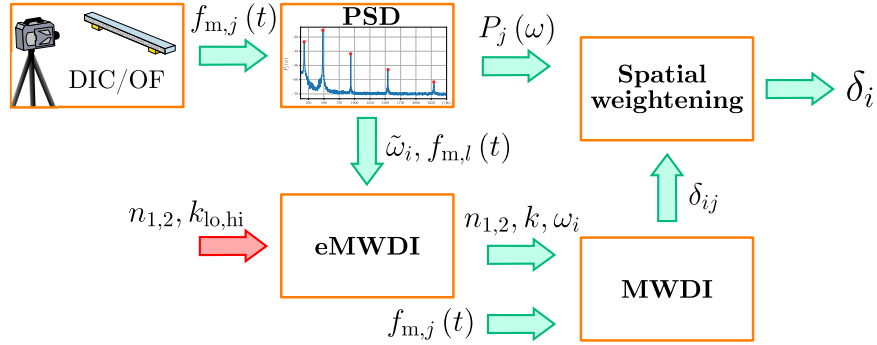
The spatially weighted MWDI method follows these steps:

1. Identify displacements from image data (optical flow or DiC) –  $f_{m,j}(t)$
2. Obtain the spatial power spectral density (PSD) –  $P_j(\omega)$
3. Roughly estimate natural frequencies from PSD –  $\tilde{\omega}_i$
4. Identify the exact natural frequencies and search for optimal  $k$  parameter using extended MWDI at regions with the highest spectral energy –  $f_{m,l}(t)$
5. Apply MWDI at all spatial locations
6. Apply spatial weighting

Identification procedure is depicted on the diagram in Fig. 1, where the input from a user is show with red arrows. Green arrows shows the output from each step. For details on each step readers are refereed to [11].

## 4 Experimental research

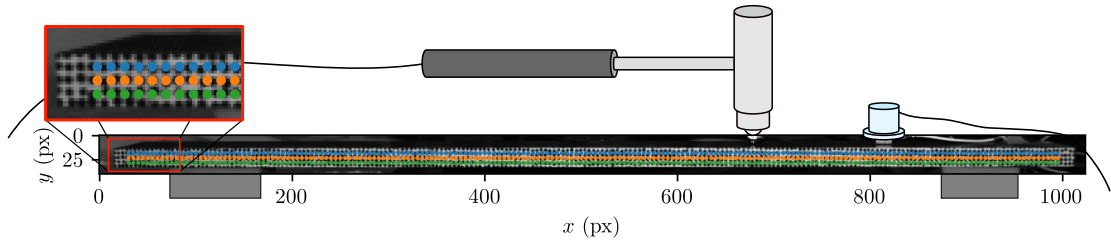
The spatially weighted MWDI method is here applied to measurements of a freely supported aluminium beam. The beam ( $l = 600$  mm,  $b = 50$  mm,  $h = 12$  mm) was excited with an modal hammer (PCB 086C03). The response was measured with an accelerometer (DYTRAN



**Figure 1:** Procedure for identification of damping. Indices are:  $i$  for modes,  $j$  for spatial location and  $l$  selected spatial locations.

3097A2T). Both locations (stimulus and accelerometer response) are chosen carefully by taking care to avoid nodes for the first five natural frequencies. The full-field displacement response was measured using a high-speed camera (Photron FASTCAM SA-Z type 2100K-M-64GB). A single frame captured with HS camera including points where displacement was identified is shown in Fig. 2. Displacement is detected using the Lucas-Kanade method [6] as implemented in the open-source package pyIDI [13].

The damping is identified from high speed camera data using the presented procedure. Com-



**Figure 2:** A single frame from the high-speed camera view, showing speckle type and displacement identification points with dots (colours correspond to: blue – top, orange – middle and green – bottom row).

parative results from the accelerometer only are identified with the MWDI method (step 5) using the same input values as identified in step 4 for the full-field identification of damping. The results are shown in Tab. 1, including comparison with the accelerometer expressed as a relative error calculated with  $error_i = (\delta_i - \delta_{acc,i}) / \delta_{acc,i} \cdot 100 \%$ .

## 5 Conclusions

Methodology for identification of structural damping from the responses obtained from the high-speed video recording was presented. Experimental results of this research confirmed that the full-field high-speed-camera-based damping identification approach can result in a similar accuracy of damping identification to an identification based on high-dynamic-range sensors.

**Table 1:** Identification results from HS camera and accelerometer data.

Natural frequency:	1 <sup>st</sup>	2 <sup>nd</sup>	3 <sup>rd</sup>	4 <sup>th</sup>	5 <sup>th</sup>
$\delta$ (%)	0.7508	0.0633	0.0358	0.1041	0.1482
$\delta_{acc}$ (%)	0.7443	0.0633	0.0364	0.1054	0.1567
error (%)	0.87	-0.06	-1.64	-1.21	-5.43

With this, the highly accurate, non-contact identification of damping based on camera measurements is confirmed, opening up new possibilities in structural health monitoring and failure analysis.

### Acknowledgements

The authors acknowledge partial financial support from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 101027829 and the Slovenian Research Agency (N2-0144).

### Literatura

- [1] J. Baqersad, P. Poozesh, C. Niezrecki, and P. Avitabile. Photogrammetry and optical methods in structural dynamics – a review. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 86:17–34, 2017.
- [2] T. J. Bebernis and D. A. Ehrhardt. High-speed 3d digital image correlation vibration measurement: Recent advancements and noted limitations. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 86:35–48, 2017.
- [3] T. Durand-Texte, M. Melon, E. Simonetto, S. Durand, and M.-H. Moulet. Single-camera single-axis vision method applied to measure vibrations. *Journal of Sound and Vibration*, 465:115012, 2020.
- [4] P. Goupillaud, A. Grossmann, and J. Morlet. Cycle-octave and related transforms in seismic signal analysis. *Geoexploration*, 23:85 – 102, 1984.
- [5] M. N. Helfrick, C. Niezrecki, P. Avitabile, and T. Schmidt. 3d digital image correlation methods for full-field vibration measurement. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 25:917–927, 2011.
- [6] B. D. Lucas and T. Kanade. An iterative image registration technique with an application to stereo vision. pages 674–679. Morgan Kaufmann Publishers Inc., 1981.
- [7] T. Siebert, R. Wood, and K. Splitthof. High speed image correlation for vibration analysis. *Journal of Physics: Conference Series*, 181:12064, 8 2009.
- [8] J. Slavič and M. Boltežar. Damping identification with the morlet-wave. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 25:1632–1645, 7 2011.

- [9] J. Slavič, I. Simonovski, and M. Boltežar. Damping identification using a continuous wavelet transform, application to real data. *Journal of Sound and Vibration*, 262:291–307, 2003.
- [10] W. J. Staszewski. Identification of damping in mdof systems using time-scale decomposition. *Journal of sound and vibration*, 203:283–305, 1997.
- [11] I. Tomac and J. Slavič. Damping identification based on a high-speed camera. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 166:108485–108497, 3 2022.
- [12] I. Tomac, Ž. Lozina, and D. Sedlar. Extended morlet-wave damping identification method. *International Journal of Mechanical Sciences*, 127, 2017.
- [13] K. Zaletelj, D. Gorjup, and J. Slavič. ladisk/pyidi: Release of the version v0.23, 9 2020.



## *Vpliv podajnosti stika na mehanski odziv dvoslojnih prostorskih nosilcev*

*G. Udovč<sup>1,2</sup>, I. Planinc<sup>2</sup>, T. Hozjan<sup>2</sup>, A. Ogrin<sup>2</sup>*

### *Influence of interlayer slip on the mechanical response of two-layer spatial beams*

**Povzetek.** V članku je analiziran vpliv podajnosti stika na mehanski odziv elastičnih dvoslojnih prostorskih nosilcev. Detajlno je bil ta vpliv analiziran z dvema različnima matematičnima modeloma dvoslojnih prostorskih nosilcev. Značilnost prvega modela je v tem, da omogoča razslojevanje slojev nosilca le v vzdolžni smeri, medtem ko je značilnost drugega modela v tem, da omogoča razslojevanje slojev nosilca tako v vzdolžni kot tudi v prečni smeri. S parametrično študijo na dvoslojnim kontinuirnem lesenem nosilcu je bilo ugotovljeno, da so poteki nekaterih fizikalnih količin bistveno bolj natančno določeni pri modelu s podajnim stikom v vzdolžni in prečni smeri, kot so poteki dobljeni z modelom s podajnim stikom le v vzdolžni smeri. Zato je pri analizi elastičnih dvoslojnih prostorskih nosilcev smiselno uporabiti model s podajnim stikom v vzdolžni in prečni smeri.

**Abstract.** The influence of interlayer slip on the mechanical response of elastic two-layer spatial beams is analysed in the paper. This influence was analysed in detail with two different mathematical models of two-layer spatial beams. A feature of the first model is that it allows interlayer slip in longitudinal direction only, while a feature of the second model is that it allows interlayer slip in both longitudinal and transverse direction. A parametric study on two-layer continuous wooden beam has shown that some physical quantities are determined with significantly higher precision with the model with interlayer slip in both longitudinal and transverse direction than they are determined with the model with interlayer slip in longitudinal direction only. Therefore, in the analysis of elastic two-layer spatial beams, it seems appropriate to use a model with interlayer slip in both longitudinal and transverse direction.

---

<sup>1</sup> Biro Udovč – projektiranje, nadzor, svetovanje Stanislav Udovč s.p.

<sup>2</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo.

## **1 Uvod**

Kompozitne konstrukcije se v gradbeništvu zelo pogosto uporabljajo. Zaradi dobre izkoriščenosti materialov v teh konstrukcijah imajo le te večjo nosilnost in posledično lahko z njimi premoščamo velike razpone. Kot elemente nosilne konstrukcije jih srečamo tako v mostogradnji kot v visokogradnji, največkrat pa pri sanacijah starejših objektov. Kompozitne konstrukcije se v gradbeništvu najpogosteje uporabljajo v obliki dvoslojnih nosilcev, grajenih iz dveh vodoravnih slojev iz različnih materialov. Mehanski odziv teh nosilcev ni odvisen le od izbire materialov temveč tudi od izbire veznih sredstev, saj z njimi zagotovimo sovprežno delovanje slojev. Vezna sredstva so ne glede na izbiro vedno nekoliko podajna, kar bistveno vpliva na mehanski odziv tovrstnih konstrukcij.

V znanstveni literaturi zasledimo številne raziskave o računskih modelih za analizo kompozitnih konstrukcij. Z analizo dvoslojnih ravninskih nosilcev se je med prvimi ukvarjal Newmark [10], kasneje pa tudi Goodman in Popov [6]. Z razvojem računalnikov so se pojavili tudi številni natančnejši matematični modeli za analizo dvoslojnih nosilcev in pripadajoči numerični postopki reševanja osnovnih enačb modelov (Girhammar & Gopu [5], Fabbrocino [4], Čas [3], Kroflič [9], Hozjan [8] in številni drugi). Skupno vsem tem raziskavam pa je to, da so dvoslojne nosilce analizirali ravninsko. Raziskav o prostorskem obnašanju dvoslojnih nosilcev je v znanstveni literaturi relativno malo. Med prvimi sta se z analizo dvoslojnih prostorskih nosilcev ukvarjala Challamel in Girhammar [1]. Prvo analitično rešitev osnovnih enačb elastičnih dvoslojnih prostorskih nosilcev s podajnim stikom v prečni in vzdolžni smeri, toda brez upoštevanja strižnih deformacij, so predstavili Čas in sodelavci [2], analizo vpliva strižnih deformacij in le vzdolžnih zamikov med slojema na mehanski odziv dvoslojnih prostorskih nosilcev pa so nedavno predstavili Udovč in sodelavci [11].

Kot kažejo številne raziskave, ima podajnost stika med slojema nosilca bistven vpliv na njegov mehanski odziv. Zato bomo v tem članku analizirali kako izbira matematičnega modela vpliva na mehanski odziv dvoslojnih prostorskih nosilcev. S tem namenom bomo v članku primerjali poteke značilnih mehanskih količin pri dvoslojnem kontinuirnem lesenem nosilcu, ki jih izračunamo z dvema različnima matematičnima modeloma. Prvi model je znan. Njegova značilnost je v tem, da omogoča razslojevanje slojev nosilca le v vzdolžni smeri (Udovč in sodelavci [11]). Drugi model je v znanstveni literaturi manj znan. Značilnost tega modela pa je v tem, da v analizi omogoča razslojevanje slojev nosilca v vzdolžni in prečni smeri. Ker je ta model in reševanje pripadajočih enačb v znanstveni literaturi praktično nepoznano, bomo v članku ta model in reševanje pripadajočih osnovnih enačb modela z deformacijsko metodo končnih elementov na kratko predstavili.

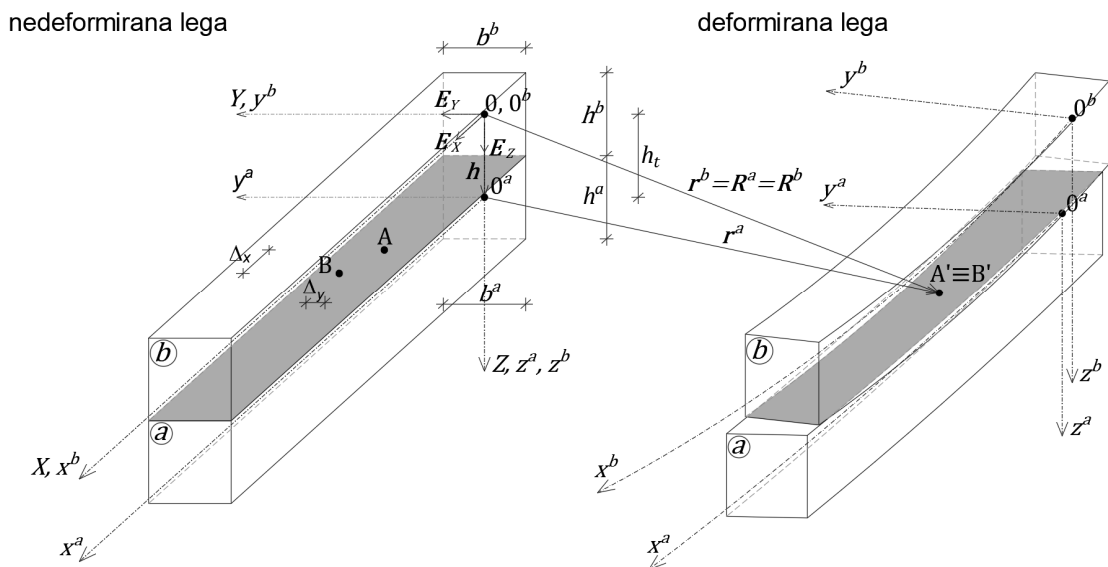
Članek ima poleg uvoda še tri kratka poglavja. V drugem poglavju predstavimo osnovne enačbe dvoslojnega prostorskega nosilca. Numerično reševanje osnovnih enačb modela z deformacijskimi končnimi elementi predstavimo v tretjem poglavju. Parametrična študija vpliva podajnosti stika na mehanski odziv dvoslojnega kontinuirnega prostorskega nosilca pa je prikazana v četrtem poglavju. Ugotovitve predstavimo v zaključkih.

## 2 Osnovne enačbe

Opazujemo dvoslojni prostorski nosilec s podajnim stikom, ki ga sestavljata sloj  $a$  in sloj  $b$ . Deformiranje nosilca opazujemo v točkovnem evklidskem prostoru z globalnim desnosučnim kartezijevim koordinatnim sistemom  $X, Y, Z$  ter pripadajočimi baznimi vektorji  $\mathbf{E}_X, \mathbf{E}_Y$  in  $\mathbf{E}_Z$ , kjer opazovališče označimo z  $0$ . Lokalni koordinatni sistem sloja  $a$  označimo z  $x^a, y^a, z^a$ , sloja  $b$  pa z  $x^b, y^b, z^b$ . Oba sta v nedeformirani legi nosilca desnosučna kartezijeva koordinatna sistema, v deformirani legi pa krivočrtna. Deformirano lego obravnavanega nosilca v točkovnem geometrijskem prostoru določata krajevna vektorja sloja  $a$  in sloja  $b$

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^a &= X^a \mathbf{E}_X + Y^a \mathbf{E}_Y + Z^a \mathbf{E}_Z = h_t \mathbf{E}_Z + \mathbf{r}^a(x^a, y^a, z^a), \\ \mathbf{R}^b &= X^b \mathbf{E}_X + Y^b \mathbf{E}_Y + Z^b \mathbf{E}_Z = \mathbf{r}^b(x^b, y^b, z^b). \end{aligned} \quad (1)$$

Oznake izbranih koordinatnih sistemov in osnovne oznake kinematičnih količin v nedeformirani in deformirani legi dvoslojnega prostorskega nosilca s podajnim stikom prikazujemo na sliki 1.



**Slika 1:** Nedeformirana in deformirana lega dvoslojnega prostorskega nosilca s podajnim stikom in oznake značilnih kinematičnih količin.

Pri izpeljavi osnovnih enačb, s katerimi opišemo deformirano lego dvoslojnega prostorskega nosilca, upoštevamo naslednje predpostavke:

- spremembe oblike in velikosti vsakega sloja nosilca so »majhne«, zato pri izpeljavi osnovnih enačb upoštevamo linearno teorijo prostorskih nosilcev,
- referenčni osi vsakega sloja nosilca sta v nedeformirani legi ravni in med seboj vzporedni,
- oblike in velikosti prečnih prerezov vsakega sloja nosilca so v nedeformirani legi poljubne in se med deformiranjem nosilca ne spreminjajo,

- prečni prerezi vsakega sloja, ki so v nedeformirani legi ravni in pravokotni na težiščno os sloja, po deformiranju ostanejo ravni, toda ne več pravokotni na deformirano težiščno os sloja, s čimer upoštevamo strižne deformacije,
- na stiku se sloja lahko zamakneta v vzdolžni in prečni smeri,
- pravokotno na stično ploskev slojev nosilca je povezava med slojema toga,
- vzdolžni in prečni zamiki med slojema nosilca so »majhni«, zato vezne enačbe med slojema upoštevamo v linearni obliki,
- zasuki prečnih prerezov slojev nosilca so za oba sloja enaki,
- vsak sloj nosilca se obnaša linearno elastično skladno s Hookovim zakonom, pri čemer so lahko materialni parametri vsakega sloja različni,
- materialni model obnašanja veznih sredstev na stiku nosilca je linearen in homogen ter v vzdolžni in prečni smeri nepovezan.

Osnovne enačbe dvoslojnih prostorskih nosilcev s podajnim stikom sestavljajo linearizirane ravnotežne, kinematične in konstitucijske enačbe homogenih prostorskih nosilcev, katere skupaj s pripadajočimi robnimi pogoji upoštevamo ločeno za vsak sloj posebej. Pri dvoslojnih prostorskih nosilcih s podajnim stikom pa k osnovnim enačbam prištevamo tudi vezne enačbe, s katerimi opišemo kompozitno delovanje slojev nosilca. Ker so osnovne enačbe homogenih prostorskih nosilcev dobro znane (Hjelmstad [7]), v nadaljevanju predstavimo le kinematične vezne enačbe. Te izpeljemo s pomočjo zahteve o soležnosti delcev slojev nosilca na stiku v deformirani legi

$$\mathbf{r}^a \left( x, y, -\frac{h^a}{2} \right) = \mathbf{r}^b \left( x^*, y^*, \frac{h^b}{2} \right) - \mathbf{h}, \quad (2)$$

kjer smo z  $x^*$  in  $y^*$  označili tisti lokalni koordinati delcev sloja  $b$  na stiku nosilca v nedeformirani legi, ki sta v deformirani legi soležni z delci na stiku sloja  $a$ . Po kratkem računu in z linearizacijo veznih enačb okoli začetne nedeformirane lege dobijo kinematične vezne enačbe preprosto obliko

$$\begin{aligned} x + u^a &= x^* + u^b + h_t \varphi_y^a, \\ y + v^a &= y^* + v^b - h_t \varphi_x^a, \\ w^a &= w^b, \\ \varphi_x^a &= \varphi_x^b, \\ \varphi_y^a &= \varphi_y^b, \\ \varphi_z^a &= \varphi_z^b, \end{aligned} \quad (3)$$

kjer smo k enačbam dodali predpostavke, da so komponente zasukov sloja  $a$  in sloja  $b$  tudi v deformirani legi enake.

Ko vezne enačbe (3) konsistentno upoštevamo v ravnotežnih, kinematičnih in konstitucijskih enačbah dvoslojnega prostorskega nosilca, le te razpadejo v dve nepovezani skupini. V prvi skupini so enačbe in pripadajoče neznane količine, ki so bistvene pri reševanju osnovnih enačb dvoslojnih prostorskih nosilcev s podajnim stikom. V drugi skupini pa so tiste enačbe in neznane količine, ki jih, če jih potrebujemo, izračunamo s pomočjo predhodno izračunanih količin prvega sistema enačb. Na ta način se med reševanjem osnovnih enačb izognemo



negativnim vplivom slabe pogojenosti enačb zaradi veznih enačb. Predstavimo le prvi sistem osnovnih enačb dvoslojnih nosilcev s podajnim stikom. Te so:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_x^a &= u^{a'}, \\
 \gamma_y^a &= v^{a'} - \varphi_z^a, \\
 \gamma_z^a &= w^{a'} + \varphi_y^a, \\
 \kappa_x^a &= \varphi_x^{a'}, \\
 \kappa_y^a &= \varphi_y^{a'}, \\
 \kappa_z^a &= \varphi_z^{a'}, \\
 \varepsilon_x^b &= u^{b'}, \\
 \gamma_y^b &= v^{b'} - \varphi_z^a,
 \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
 N_x^{a'} + p_{x,z}^a + p_{x,k}^a &= 0, \\
 N_y^{a'} + p_{y,z}^a + p_{y,k}^a &= 0, \\
 N_z^{a'} + p_{z,z}^a + p_{z,z}^b &= 0, \\
 M_x^{a'} + m_{x,z}^a + m_{x,z}^b + h_t p_{y,k}^a &= 0, \\
 M_y^{a'} - N_z + m_{y,z}^a + m_{y,z}^b - h_t p_{x,k}^a &= 0, \\
 M_z^{a'} + N_y^a + N_y^b + m_{z,z}^a + m_{z,z}^b &= 0, \\
 N_x^{b'} + p_{x,z}^b + p_{x,k}^b &= 0, \\
 N_y^{b'} + p_{y,z}^b + p_{y,k}^b &= 0,
 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
 N_x^a &= E^a A_x^a \varepsilon_x^a = N_{x,c}^a, \\
 N_y^a &= G^a A_y^a \gamma_y^a = N_{y,c}^a, \\
 N_z &= G^a A_{z,eff} \gamma_z^a = N_{z,c}^a, \\
 M_x &= G^a I_{t,eff} \kappa_x^a = M_{x,c}^a, \\
 M_y &= E^a I_{y,eff} \kappa_y^a + E^a I_{yz,eff} \kappa_z^a = M_{y,c}^a, \\
 M_z &= E^a I_{yz,eff} \kappa_y^a + E^a I_{z,eff} \kappa_z^a = M_{z,c}^a, \\
 N_x^b &= E^b A_x^b \varepsilon_x^b = N_{x,c}^b, \\
 N_y^b &= G^b A_y^b \gamma_y^b = N_{y,c}^b.
 \end{aligned} \tag{6}$$

Enačbe (4) do (6) imenujemo posplošene ravnotežne enačbe dvoslojnih prostorskih nosilcev s podajnim stikom. Sestavlja jih 24 diferencialnih in algebrskih enačb za prav toliko neznanih količin:  $\varepsilon_x^a$ ,  $\gamma_y^a$ ,  $\gamma_z^a$ ,  $\kappa_x^a$ ,  $\kappa_y^a$ ,  $\kappa_z^a$ ,  $\varepsilon_x^b$  in  $\gamma_y^b$ ,  $N_x^a$ ,  $N_y^a$ ,  $N_z = N_z^a + N_z^b$ ,  $M_x = M_x^a + M_x^b$ ,  $M_y = M_y^a + M_y^b$ ,  $M_z = M_z^a + M_z^b$ ,  $N_x^b$  in  $N_y^b$ ,  $u^a$ ,  $v^a$ ,  $w^a$ ,  $\varphi_x^a$ ,  $\varphi_y^a$ ,  $\varphi_z^a$ ,  $u^b$  in  $v^b$ . V ravnotežnih enačbah (5) nastopajo še neznanne komponente linijske kontaktne obremenitve, ki so posledica podajnosti stika med slojema v vzdolžni in prečni smeri. Glede na vezne enačbe in skladno s privzetimi predpostavkami te enačbe zapišemo v obliki

$$\begin{aligned}
 p_{x,k}^a &= -p_{x,k}^b = p_{x,k,c}^a(\Delta_x) = K_x \Delta_x, \\
 p_{y,k}^a &= -p_{y,k}^b = p_{y,k,c}^a(\Delta_y) = K_y \Delta_y, \\
 \Delta_x &= u^b - u^a + h_t \varphi_y^a, \\
 \Delta_y &= v^b - v^a - h_t \varphi_x^a,
 \end{aligned} \tag{7}$$

kjer smo zamika med slojema nosilca označili z  $\Delta_x$  in  $\Delta_y$ , materialni konstanti konstitucijskega zakona stika pa z  $K_x$  in  $K_y$ . Zaradi kinematičnih veznih enačb se konsistentno preoblikujejo tudi kinematični in statični robni pogoji. Robni pogoji k posplošenim ravnotežnim enačbam dvoslojnih prostorskih nosilcev (4) do (6) so:

$$\begin{array}{ll}
 u^a(0) = u_0^a & N_x^a(0) - F_{x,0}^a = 0, \\
 v^a(0) = v_0^a & N_y^a(0) - F_{y,0}^a = 0, \\
 w^a(0) = w_0^a & N_z(0) - F_{z,0} = 0, \\
 \varphi_x^a(0) = \varphi_{x,0}^a & M_x(0) - M_{x,0} = 0, \\
 \varphi_y^a(0) = \varphi_{y,0}^a & M_y(0) - M_{y,0} = 0, \\
 \varphi_z^a(0) = \varphi_{z,0}^a & M_z(0) - M_{z,0} = 0, \\
 u^b(0) = u_0^b & N_x^b(0) - F_{x,0}^b = 0, \\
 v^b(0) = v_0^b & N_y^b(0) - F_{y,0}^b = 0,
 \end{array} \quad \text{ali} \tag{8}$$

$$\begin{array}{ll}
 u^a(L) = u_L^a & N_x^a(L) + F_{x,L}^a = 0, \\
 v^a(L) = v_L^a & N_y^a(L) + F_{y,L}^a = 0, \\
 w^a(L) = w_L^a & N_z(L) + F_{z,L} = 0, \\
 \varphi_x^a(L) = \varphi_{x,L}^a & M_x(L) + M_{x,L} = 0, \\
 \varphi_y^a(L) = \varphi_{y,L}^a & M_y(L) + M_{y,L} = 0, \\
 \varphi_z^a(L) = \varphi_{z,L}^a & M_z(L) + M_{z,L} = 0, \\
 u^b(L) = u_L^b & N_x^b(L) + F_{x,L}^b = 0, \\
 v^b(L) = v_L^b & N_y^b(L) + F_{y,L}^b = 0.
 \end{array} \quad \text{ali} \tag{9}$$

Tu smo predpisane kinematične in statične vrednosti pri  $x = 0$  označili s spodnjim indeksom 0, na primer  $u_0^a$ , oziroma pri  $x = L$  s spodnjim indeksom  $L$ , na primer  $v_L^a$ . Poudarimo pa dobro znano dejstvo, da tam, kjer smo predpisali kinematične robne pogoje, ne moremo predpisati statičnih in obratno, kar smo v enačbah označili z izrazom ali.

### 3 Deformacijska metoda končnih elementov

Posplošene ravnotežne enačbe dvoslojnih prostorskih nosilcev (4) do (6) rešimo numerično z metodo končnih elementov. Da se izognemo vsem vrstam blokiranja, ki so značilna za končne elemente zasnovane na pomikih, enačbe rešimo z deformacijsko metodo končnih elementov. Za analizo dvoslojnih ravninskih nosilcev s podajnim stikom jo je detajlno predstavil Čas [3], za analizo dvoslojnih prostorskih nosilcev s podajnim stikom v vzdolžni smeri pa Udovč s sodelavci [11]. Osnovna značilnost te metode je v tem, da osnovne enačbe oziroma izrek o virtualnem delu preoblikujemo tako, da lahko v posplošenih ravnotežnih enačbah dvoslojnega prostorskega nosilca interpoliramo le deformacijske količine. Praviloma jih interpoliramo z Lagrangeovimi interpolacijskimi polinomi stopnje  $n - 1$ , ki jih v nadaljevanju označimo s  $P_i(x)$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Diskretne posplošene ravnotežne enačbe deformacijskega končnega elementa z dolžino  $L_e$  so ( $i=1, 2, \dots, n$ ):

$$\begin{aligned}
 g_i &= \int_0^{L_e} (N_{x,c}^a - N_x^a) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+n} &= \int_0^{L_e} (N_{y,c}^a - N_y^a) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+2n} &= \int_0^{L_e} (N_{z,c} - N_z) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+3n} &= \int_0^{L_e} (M_{x,c} - M_x) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+4n} &= \int_0^{L_e} (M_{y,c} - M_y) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+5n} &= \int_0^{L_e} (M_{z,c} - M_z) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+6n} &= \int_0^{L_e} (N_{x,c}^b - N_x^b) P_i d\xi = 0, \\
 g_{i+7n} &= \int_0^{L_e} (N_{y,c}^b - N_y^b) P_i d\xi = 0, \\
 g_{8n+1} &= u^a(L_e) - u^a(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \varepsilon_{x,i}^a d\xi = 0, \\
 g_{8n+2} &= v^a(L_e) - v^a(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \gamma_{y,i}^a d\xi - \varphi_z^a(0) L_e - \\
 &\quad - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} \int_0^x P_i \kappa_{z,i}^a d\xi d\xi = 0, \\
 g_{8n+3} &= w^a(L_e) - w^a(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \gamma_{z,i}^a d\xi + \varphi_y^a(0) L_e + \\
 &\quad + \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} \int_0^x P_i \kappa_{y,i}^a d\xi d\xi = 0,
 \end{aligned} \tag{11}$$

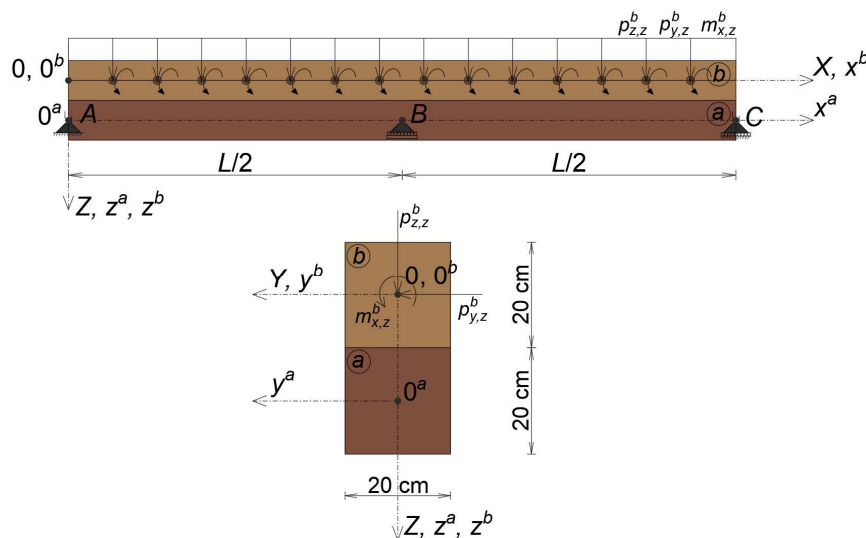
$$\begin{aligned}
 g_{8n+4} &= \varphi_x^a(L_e) - \varphi_x^a(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \kappa_{x,i}^a d\xi = 0, \\
 g_{8n+5} &= \varphi_y^a(L_e) - \varphi_y^a(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \kappa_{y,i}^a d\xi = 0, \\
 g_{8n+6} &= \varphi_z^a(L_e) - \varphi_z^a(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \kappa_{z,i}^a d\xi = 0, \\
 g_{8n+7} &= u^b(L_e) - u^b(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \varepsilon_{x,i}^b d\xi = 0, \\
 g_{8n+8} &= v^b(L_e) - v^b(0) - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} P_i \gamma_{y,i}^b d\xi - \varphi_z^a(0) L_e - \\
 &\quad - \sum_{i=1}^n \int_0^{L_e} \int_0^x P_i \kappa_{z,i}^a d\xi d\xi = 0, \\
 g_{8n+9} &= S_1 + N_x^a(0) = 0, \\
 g_{8n+10} &= S_2 + N_y^a(0) = 0, \\
 g_{8n+11} &= S_3 + N_z(0) = 0, \\
 g_{8n+12} &= S_4 + M_x(0) = 0, \\
 g_{8n+13} &= S_5 + M_y(0) = 0, \\
 g_{8n+14} &= S_6 + M_z(0) = 0, \\
 g_{8n+15} &= S_7 + N_x^b(0) = 0, \\
 g_{8n+16} &= S_8 + N_y^b(0) = 0, \\
 g_{8n+17} &= S_9 - N_x^a(0) + \int_0^{L_e} (p_{x,z}^a + p_{x,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+18} &= S_{10} - N_y^a(0) + \int_0^{L_e} (p_{y,z}^a + p_{y,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+19} &= S_{11} - N_z(0) + \int_0^L (p_{z,z}^a + p_{z,z}^b) dx = 0, \\
 g_{8n+20} &= S_{12} - M_x(0) + \int_0^{L_e} (m_{x,z}^a + m_{x,z}^b + h_t p_{y,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+21} &= S_{13} - M_y(0) - \int_0^{L_e} (N_z - m_{y,z}^a - m_{y,z}^b + h_t p_{x,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+22} &= S_{14} - M_z(0) + \int_0^{L_e} (N_y^a + N_y^b + m_{z,z}^a + m_{z,z}^b) dx = 0, \\
 g_{8n+23} &= S_{15} - N_x^b(0) + \int_0^{L_e} (p_{x,z}^b - p_{x,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+24} &= S_{16} - N_y^b(0) + \int_0^{L_e} (p_{y,z}^b - p_{y,k}^a) dx = 0,
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

$$\begin{aligned}
 g_{8n+20} &= S_{12} - M_x(0) + \int_0^{L_e} (m_{x,z}^a + m_{x,z}^b + h_t p_{y,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+21} &= S_{13} - M_y(0) - \int_0^{L_e} (N_z - m_{y,z}^a - m_{y,z}^b + h_t p_{x,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+22} &= S_{14} - M_z(0) + \int_0^{L_e} (N_y^a + N_y^b + m_{z,z}^a + m_{z,z}^b) dx = 0, \\
 g_{8n+23} &= S_{15} - N_x^b(0) + \int_0^{L_e} (p_{x,z}^b - p_{x,k}^a) dx = 0, \\
 g_{8n+24} &= S_{16} - N_y^b(0) + \int_0^{L_e} (p_{y,z}^b - p_{y,k}^a) dx = 0,
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

kjer smo s  $S_1, S_2, \dots, S_{16}$  označili posplošene točkovne sile na robovih končnega elementa, ki so lahko dejanske zunanje sile ali pa notranje sile na robovih končnih elementov na stiku med elementoma. Z enačbami (10) do (13) v nadaljevanju sestavimo diskretne posplošene ravnotežne enačbe dvoslojnega prostorskega nosilca, ki jih rešimo z znanimi matematičnimi postopki, pri tem pa praviloma integrale v enačbah (10) do (13) izvednotimo z Gaussovo integracijsko shemo. V nadaljevanju upoštevamo, da velja:  $w^a = w^b = w$ ,  $\varphi_x^a = \varphi_x^b = \varphi_x$ ,  $\varphi_y^a = \varphi_y^b = \varphi_y$  in  $\varphi_z^a = \varphi_z^b = \varphi_z$ .

#### 4 Računski primer

Vpliv podajnosti stika na togost dvoslojnih prostorskih nosilcev analiziramo pri dvoslojnem lesenem kontinuirnem nosilcu dolžine  $L = 800$  cm. V parametrični študiji se omejimo na dvoslojne nosilce, ki se kot nosilni konstrukcijski elementi največkrat uporabljajo v gradbeništvu. Značilnost teh nosilcev je predvsem v tem, da jih sestavljata sloja z vsaj enkrat simetričnima prečnima prerezoma (slika 2). Vpliv na togost obravnavanega nosilca bomo v parametrični študiji prikazali za dva različna matematična modela dvoslojnih prostorskih nosilcev. Značilnost prvega modela je v tem, da z njim lahko analiziramo razslojevanje med slojema nosilca le v vzdolžni smeri. Osnovne enačbe tega modela in način reševanja pripadajočih osnovnih enačb je detajlno predstavil Udovč s sodelavci [11]. Ta model in rezultate povezane z njim bom v tem računskem primeru označili z X. Drugi model, ki ga bomo označili X&Y, pa smo predstavili v tem članku. Značilnost tega modela je, da lahko z njim analiziramo razslojevanje stika med slojema v vzdolžni in prečni smeri.



Slika 2: Geometrijski podatki o dvoslojnem kontinuirnem lesenem nosilcu ter podatki o obtežbah.

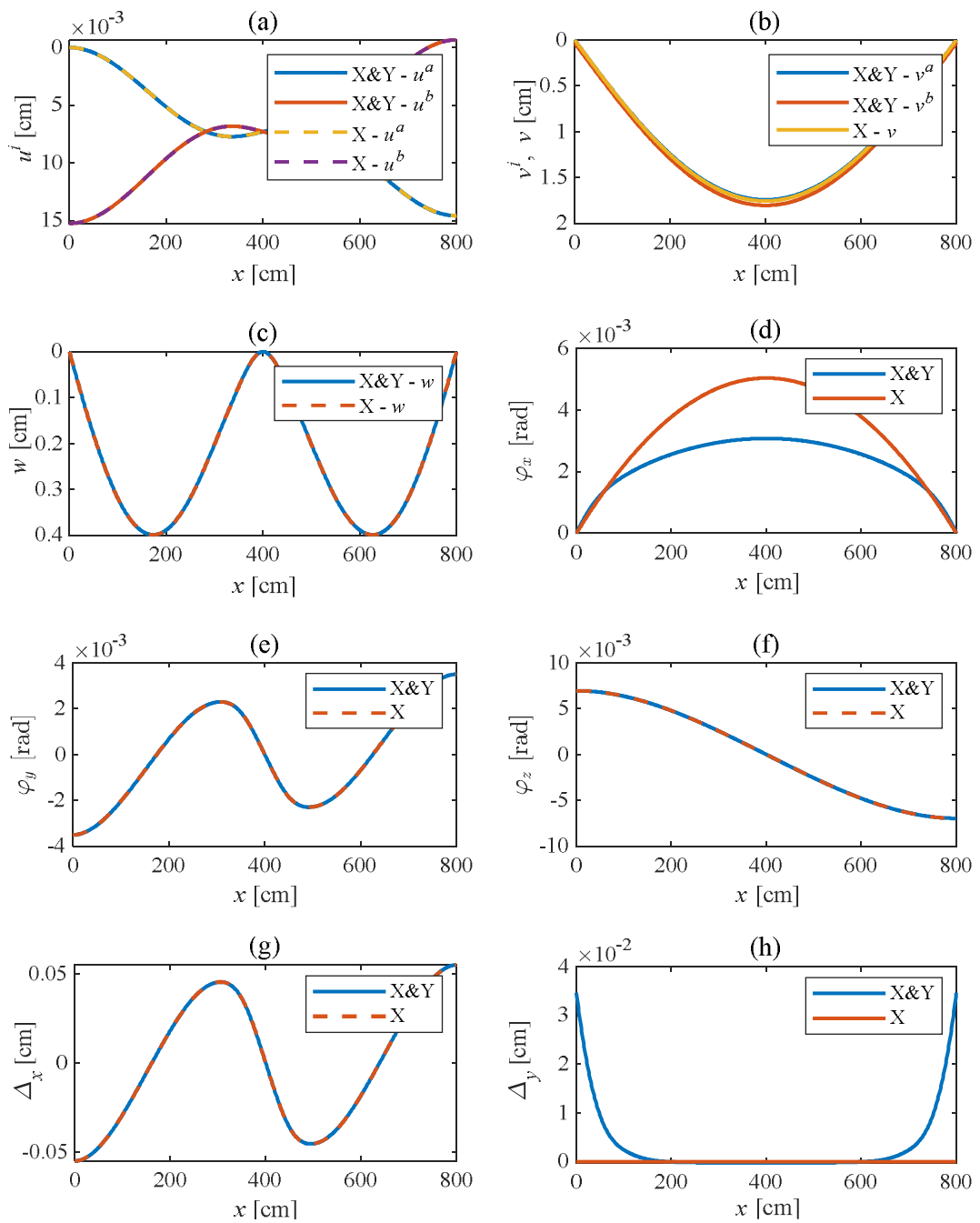
Kot že rečeno, v računskem primeru analiziramo dvoslojni kontinuirni leseni nosilec z dvema različnima matematičnima modeloma. Nosilec je v težišču prečnega prereza sloja  $b$  obtežen z enakomernima linijskima obtežbama  $p_{z,z}^b = 10$  kN/m in  $p_{y,z}^b = 1$  kN/m ter z enakomerno torzijsko linijsko momentno obtežbo  $m_{x,z}^b = 0,1$  kNm/m. Podprt je na treh mestih, kjer podpora v točki  $A$  preprečuje pomike  $u^a$ ,  $v^a$ ,  $w$  in zasuk  $\varphi_x$ , podpora v točki  $B$  preprečuje zgolj pomik  $w$ , podpora v točki  $C$  pa preprečuje pomika  $v^a$  in  $w$  ter zasuk  $\varphi_x$ . Dimenzije

prečnega prereza sloja  $a$  so  $b^a/h^a = 20/20$  cm, sloja  $b$  pa  $b^b/h^b = 20/20$  cm. Geometrijske podatke o nosilcu ter podatke o obtežbi prikazujemo na sliki 2. Oba sloja nosilca sta iz smrekovega lesa, pri čemer smo za sloj  $a$  izbrali les trdnostnega razreda razred C30, za sloj  $b$  pa C24. Upoštevane materialne parametre linearne konstitucijskega modela obeh slojev nosilca prikazujemo v tabeli 1. Povezano delovanje slojev dvoslojnega kontinuirnega lesenega nosilca zagotovimo z jeklenimi vijaki premera  $d = 24$  mm, ki jih vzdolž stične ravnine med slojema razporedimo na enakomerni razdalji  $e = 30$  cm. Materialna parametra linearne konstitucijskega modela stika določimo skladno s standardom SIST EN 1995-1-1:2005. Brez izgube na splošnosti predpostavimo, da je podajnost veznih sredstev v vzdolžni in prečni smeri pri modelu X&Y enaka, zato je  $K_x = K_y = \rho_m^{1,5} \frac{d}{23} \frac{1}{e} = 3,205 \frac{\text{kN}}{\text{cm}^2}$ . Oba primera bomo v parametrični študiji analizirali s šestnajstimi deformacijskimi končnimi elementi, pri katerih bomo deformacijske količine interpolirali z Lagrangeovimi polinomi četrte stopnje, integrale v enačbah pa bomo iz vrednotili s pet točkovno Gaussovo integracijsko shemo. Konvergenčne študije, ki sta jih za sorodne končne elemente prikazala Čas [3] in Udovč s sodelavci [11], dokazujejo, da so ti končni elementi zelo natančni in je zato njihova uporaba v nadaljnjih analizah upravičena.

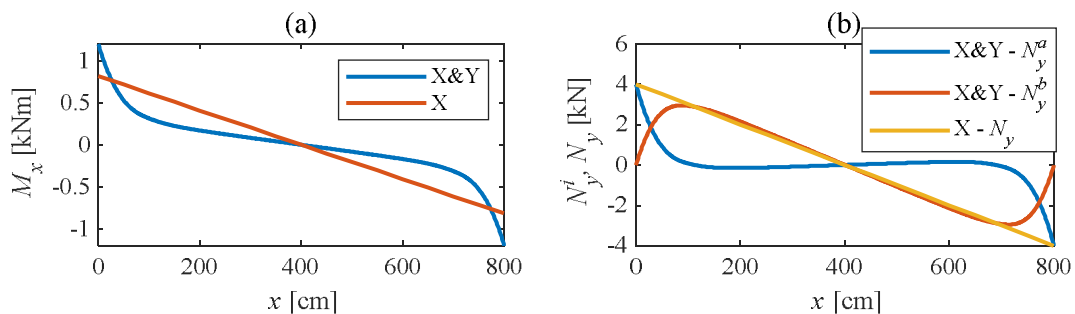
**Tabela 1:** Materialni parametri slojev  $a$  in  $b$ .

	$E^i$ [kN/cm <sup>2</sup> ]	$G^i$ [kN/cm <sup>2</sup> ]	$\rho_m^i$ [kg/m <sup>3</sup> ]
sloj $a$	1200	75	460
sloj $b$	1100	69	420

Na sliki 3 prikazujemo poteke značilnih kinematičnih količin v vzdolžni osi nosilca. Glede na osno simetrično obliko prečnih prerezov slojev nosilca so rezultati pričakovani. Opazimo, da izbira matematičnega modela za analizo dvoslojnega prostorskega nosilca s podajnim stikom praktično nima vpliva na poteke kinematičnih količin  $u^a$ ,  $u^b$ ,  $w$ ,  $\varphi_y$ ,  $\varphi_z$  in  $\Delta_x$ . Do manjših razlik pride pri prečnih pomikih  $v$ ,  $v^a$  in  $v^b$ , bistvene razlike pa se pojavijo pri poteku torzijskega zasuka  $\varphi_x$ , kar dokazuje, da je matematični model X torzijsko bolj tog, kot je model X&Y. Seveda pa pride tudi do pričakovanih razlik pri poteku prečnega zdrsa  $\Delta_y$ . Še bolj izrazit pa je vpliv izbire matematičnega modela za analizo dvoslojnih prostorskih nosilcev na potek torzijskega momenta  $M_x$  in prečnih sil  $N_y$ ,  $N_y^a$  ter  $N_y^b$ . Ta vpliv prikazujemo na sliki 4, kjer opazimo, da sta poteka torzijskega momenta in prečne sile v osi nosilca v primeru, ko ga analiziramo z modelom X, linearna, za primer modela X&Y pa nelinearna. Na sliki 4 je lepo prikazano kako se zunanja obtežba  $p_{y,z}^b$  postopno, preko veznih sredstev, prenese iz sloja  $b$  v sloj  $a$  obravnavanega nosilca. Te interakcije med slojema nosilca v analizi z matematičnim modelom X pričakovano ne zaznamo.



**Slika 3:** Potek značilnih kinematičnih količin za analizirani nosilec: (a) osni pomiki slojev, (b) prečni pomiki slojev v smeri  $y$ , (c) navpični povesi, (d) zasuki okoli osi  $x$ , (e) zasuki okoli osi  $y$ , (f) zasuki okoli osi  $z$ , (g) zdrsi v vzdolžni smeri in (h) zdrsi v prečni smeri.



Slika 4: Potek značilnih statičnih količin za analizirani nosilec: (a) torzijski momenti in (b) prečne sile v smeri  $y$ .

## 5 Zaključek

V članku smo analizirali vpliv podajnosti stika na mehanski odziv elastičnih dvoslojnih prostorskih nosilcev. Detajlno smo analizirali, kako izbira matematičnega modela dvoslojnega prostorskega nosilca s podajnim stikom vpliva na potek značilnih fizikalnih količin. Rezultate smo primerjali med dvema modeloma. Značilnost prvega modela je v tem, da omogoča razslojevanje slojev nosilca le v vzdolžni smeri, drugega pa v tem, da omogoča razslojevanje v vzdolžni in prečni smeri. Ker je matematični model s podajnim stikom v vzdolžni in prečni smeri in reševanje pripadajočih enačb z deformacijsko metodo končnih elementov v literaturi neznan, smo v članku tudi na kratko predstavili osnovne enačbe tega modela in reševanje le teh z deformacijsko metodo končnih elementov.

S parametrično študijo smo na primeru dvoslojnega kontinuirnega lesenega nosilca ugotovili, da je razlika med poteki fizikalnih količin v osi nosilca, ki jih izračunamo z modeloma, največja pri poteku torzijskega zasuka in momenta ter pri poteku prečnih sil v smeri  $y$ , medtem ko je razlika pri potekih preostalih fizikalnih količin nosilca zanemarljiva. Ker so izračunani poteki fizikalnih količin pri modelu nosilca s podajnim stikom v vzdolžni in prečni smeri bolj natančni od rezultatov dobljenih z modelom nosilca s podajnim stikom le v vzdolžni smeri, je smiselno v analizi dvoslojnih prostorskih nosilcev uporabiti model nosilca s podajnim stikom v vzdolžni in prečni smeri.

## Zahvala

Zahvaljujemo se Javni agenciji za raziskovalno dejavnost Republike Slovenije, ki je s projektoma P2-0260 in Z2-3203 finančno podprla to delo.

## Literatura

- [1] N. Challamel, U. A. Girhammar, *Lateral-torsional buckling of partially composite horizontally layered or sandwich-type beams under uniform moment*, Journal of Engineering Mechanics. 139, 1047--1064, 2013.
- [2] B. Čas, I. Planinc, S. Schnabl, *Analytical solution of three-dimensional two-layer composite beam with interlayer slips*, Engineering Structures. 173, 269--282, 2018.



- [3] B. Čas, *Nelinearna analiza kompozitnih nosilcev z upoštevanjem zdrsa med sloji*, Doktorska disertacija. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo, 2004.
- [4] G. Fabbrocino, G. Manfredi, E. Cosenza, *Non-linear analysis of composite beams under positive bending*, Computers and Structures. 70, 77--89, 1999.
- [5] U. A. Girhammar, V. K. A. Gopu, *Composite beam-columns with inter-layer slip-exact analysis*, Journal of Structural Engineering, ASCE. 199(4), 1265--1282, 1993.
- [6] J. R. Goodman, E. P. Popov, *Layered wood systems with inter-layer slip*, Wood Science. 1(3), 148--158, 1969.
- [7] K. D. Hjelmstad, *Fundamentals of Structural Mechanics, Second Edition*, Illinois: Springer. 2005.
- [8] T. Hozjan, *Nelinearna analiza vpliva požara na sovprežne linijske konstrukcije*, Doktorska disertacija. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo, 2009.
- [9] A. Kroflič, *Nelinearna analiza večslojnih kompozitnih linijskih konstrukcij*, Doktorska disertacija. Ljubljana: Univerza v Ljubljani, Fakulteta za gradbeništvo in geodezijo, 2012.
- [10] N. M. Newmark, C. P. Siest, C. P. Viest, *Test and analysis of composite beams with incomplete interaction*, Proceedings of the Society for Experimental Stress Analysis. 1, 75--92, 1951.
- [11] G. Udovč, I. Planinc, T. Hozjan, *Analiza dvoslojnih prostorskih kompozitnih nosilcev z upoštevanjem strižnih deformacij in vzdolžnih zamikov med slojema*, Srečanje kuhljevi dnevi 2021.



## *Izboljšano določevanje porazdelitvene funkcije orientacije vlaken v polimerih, ojačanih s kratkimi vlakni*

*Janez Urevc<sup>1</sup>, Matija Nabergoj<sup>1</sup> in Miroslav Halilović<sup>1</sup>*

## *Improved determination of fiber orientation distribution function in short-fiber-reinforced polymers*

**Povzetek.** Mehanske lastnosti polimerov ojačanih s kratkimi vlakni so močno odvisne od orientacije vlaken. V simulacijah brizganja je orientacija vlaken zasledovana s tenzorjem orientacije drugega reda, na osnovi katerega se nato določi mehanske lastnosti. V teoriji je porazdelitvena funkcija orientacije (ODF) osnovna funkcija, ki določa evolucijo tenzorja orientacije. Njena rekonstrukcija, ki je običajno izvedena z metodo sferičnih harmonikov, je lahko nenatančna in vodi do negativnih vrednosti pri nekaterih stanjih orientiranosti. V tem prispevku predstavljamo novo definicijo dvoparametrične ODF, na osnovi katere nova aproksimacija tenzorja orientacije četrtega reda vodi do napovedi orientacije vlaken, ki je primerljiva z obstoječimi metodami. Poleg tega pa je rekonstrukcija ODF bistveno izboljšana.

**Abstract.** The mechanical properties of short-fiber-reinforced polymers are highly dependent on fiber orientations. In injection molding simulations, the orientations of fibers are followed by a second-order orientation tensor on the basis of which the mechanical properties are determined. In theory, the orientation distribution function (ODF) is the basic function that determines the evolution of the orientation tensor. Its reconstruction which is usually performed by the method of spherical harmonics can be inaccurate and leads to negative values in some states of orientation. In this paper we present a new definition of two-parameter ODF. On its basis we derived a new approximation of the fourth-order orientation tensor leading to a fiber orientation prediction comparable to existing methods. In addition, ODF reconstruction is also significantly improved.

### **1 Uvod**

Polimeri, ojačani s kratkimi vlakni, imajo dobro razmerje med natezno trdnostjo in težo, dobro dimenzijsko stabilnost in termomehanske lastnosti. Izdelava takšnih izdelkov, ki je običajno izvedena z injekcijskim brizganjem, pa omogoča cenovno ugodno proizvodnjo izdelkov kompleksnih oblik [5].

Mehanske lastnosti takšnih polimerov so močno odvisne od orientacije vlaken, ta pa je odvisna od postopka brizganja. Vlakna se med brizganjem usmerjajo skladno z razmerami v toku taline in na koncu ostanejo zamrznjena na različnih delih izdelka v različnih smereh.

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

Najcelovitejši opis usmerjenosti vlaken podaja ti. *porazdelitvena funkcija orientacije* (ang. orientation distribution function, ODF), ki nam pove, kolikšna je verjetnost, da se vlakno v dani materialni točki nahaja v določeni smeri. ODF se uporablja v evolucijskih enačbah za določitev orientiranosti vlaken v simulacijah postopka brizganja ter v konstitutivnih modelih za popis mehanskega odziva izdelka [9].

ODF se običajno rekonstruira iz simulacije brizganja, pri katerih je usmerjenost vlaken popisana s tenzorji orientacije [1]. Rekonstrukcija ODF se klasično izvaja z metodo sferičnih harmonikov, kjer je ODF zapisana v obliki razvoja v Fourierjevo vrsto [8]. Iz praktičnih razlogov sta v tem razvoju upoštevana samo tenzorja orientacije drugega in četrtega reda, slabost tega pa je, da ODF lahko zavzame tudi fizikalno nedopustne vrednosti (npr. negativne) ali da slabo rekonstruira določene orientacije. Breuer je v [2] pokazal, da tudi uporaba členov vrste do vključno tenzorja orientacije osmega reda še ne odpravi teh težav. Z namenom rešitve problema nedopustnih vrednosti sta Doghri in Tinel [4] predlagala aproksimacijo rekonstruirane ODF z dodatnimi kriteriji, za izboljšanje napovedi pri določenih orientacijah pa sta Müller in Böhlke [6] predstavila metodo maksimalne entropije. Z njo je Breuer [2] izvedel rekonstrukcijo ODF z uvedbo predpostavljene Binghamove verjetnostne porazdelitvene funkcije orientacije.

Naslednji izziv pri uporabi tenzorjev orientacije pa je določitev evolucijske enačbe za orientacijo vlaken v fazi brizganja v zaključeni obliki. Evolucijske enačbe za tenzor sode stopnje namreč vedno vsebujejo tenzor naslednje sode stopnje; konkretno to pomeni, da za spremljanje časovnega poteka tenzorja drugega reda evolucijska enačba vsebuje tudi tenzor četrtega reda. Za slednjega bi spet lahko zapisali evolucijsko enačbo, a bi ta vsebovala tenzor šestega reda, katerega pa zaradi neskončnosti Fourierjeve vrste, ki tenzorje vsebuje, tudi ni možno na tak način določiti. Tenzorje vseh redov bi bilo sicer možno določiti neposredno iz ODF, če bi bila ta znana, a ker - kot rečeno - ta ni na voljo, tenzor orientacije četrtega reda dandanes aproksimirajo iz tenzorja drugega reda, obsežen pregled metod aproksimacije pa je predstavljen v [2].

V tem delu bomo predstavili, kako smo iz rezultatov simulacij injekcijskega brizganja rekonstruirali ODF. Rekonstrukcija ODF je bila izvedena na podlagi tenzorjev orientacije drugega reda brez uporabe metode sferičnih harmonikov. Prikazan pristop ne daje nefizikalnih rešitev in lepše popiše obnašanje pri visokih verjetnostih, poleg tega pa tudi ni potrebno reševati minimizacijskega problema kot v primeru metode maksimalne entropije. Poleg same rekonstrukcije ODF pa je z namenom boljše uporabnosti prikazana tudi zaključena polinomska rešitev za tenzor orientacije četrtega reda, pridobljena neposredno na osnovi rekonstruirane ODF. Koeficienti polinoma niso bili kalibrirani na konkretne tokove fluida (kot je to običajno pri klasičnih zaključenih rešitvah), ampak vrednosti sledijo neposredno iz definicije ODF, zato smo razmere pri različnih tokovih lahko uporabili za verifikacijo pristopa.

## 2 Teoretične osnove

Orientacijo posameznega vlakna v polimerni matrici popišemo v sferičnih koordinatah z enotskim vektorjem  $\mathbf{p}(\theta, \phi) = (p_1, p_2, p_3)^T = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)^T$ , kjer je  $\phi \in [0, 2\pi)$  in  $\theta \in [0, \pi]$ . Porazdelitvena funkcija orientacije  $\psi$  (ODF) je definirana tako, da je verjetnost, da se orientacija vlakna nahaja med koti  $[\theta_1, \theta_1 + d\theta]$  in  $[\phi_1, \phi_1 + d\phi]$  podana z

$$P(\theta_1 \leq \theta \leq \theta_1 + d\theta, \phi_1 \leq \phi \leq \phi_1 + d\phi) = \psi(\theta_1, \phi_1) \sin \theta_1 d\theta d\phi, \quad (1)$$

pri čemer mora biti  $\psi(\mathbf{p})$  periodična  $\psi(\mathbf{p}) = \psi(-\mathbf{p})$  in normalizirana  $\oint \psi(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = 1$ . Tenzorja orientacij drugega in četrtega reda podajata zvezi [1]:

$$a_{ij} = \oint p_i p_j \psi(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (2)$$

$$a_{ijkl} = \oint p_i p_j p_k p_l \psi(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (3)$$

Analogno pa se lahko določi še tenzorje višjih redov. Tensor orientacije drugega reda  $a_{ij}$  je najkompaktnjša oblika predstavitve orientacije vlaken v statističnem smislu. Zaradi pogoja normiranosti ODF je neodvisnih samo pet komponent tenzorja. Grafično si tenzor lahko predstavljamo kot elipsoid, kjer so lastne vrednosti vektorja njegove polosi.

Če osnovni koordinatni sistem poravnamo z glavnimi osmi tenzorja orientacije drugega reda, lahko lastne vrednosti tenzorja izračunamo kot

$$a_1 = \oint \psi(\theta, \phi) (\sin^2 \theta \cos^2 \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (4)$$

$$a_2 = \oint \psi(\theta, \phi) (\sin^2 \theta \sin^2 \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (5)$$

medtem ko lahko tretjo lastno vrednost zaradi normiranja dobimo kot  $a_3 = 1 - a_1 - a_2$ .

Splošen tenzor četrtega reda ima 81 komponent, a ker je tenzor orientacije popolnoma simetričen, je popolnoma neodvisnih le 15 komponent. Ob predpostavki ortotropnosti materiala v vsaki točki lahko njihovo število zmanjšamo na šest z upoštevanjem soležnosti glavnih osi tenzorjev drugega in četrtega reda [3]. Če želimo namreč tenzor orientacije četrtega reda izraziti s tenzorjem orientacije drugega reda, morajo glavne osi obeh tenzorjev sovpadati, saj bi v nasprotnem primeru tenzor četrtega reda vseboval informacije o smereh, ki v tenzorju drugega reda niso vsebovane. Neodvisne komponente tenzorja orientacije četrtega reda izračunamo z enačbami

$$a_{1111} = \oint \psi(\theta, \phi) (\sin^4 \theta \cos^4 \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (6)$$

$$a_{2222} = \oint \psi(\theta, \phi) (\sin^4 \theta \sin^4 \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (7)$$

$$a_{3333} = \oint \psi(\theta, \phi) (\cos^4 \theta) \sin \theta d\theta d\phi \quad (8)$$

$$a_{1111} + a_{1212} + a_{1313} = a_1, \quad (9)$$

$$a_{1212} + a_{2222} + a_{2323} = a_2 \quad (10)$$

$$a_{1313} + a_{2323} + a_{3333} = a_3. \quad (11)$$

### 2.1 Rekonstrukcija ODF

Najpogostejša metoda za rekonstrukcijo ODF je metoda sferičnih harmonikov [8], kjer ODF definiramo kot neskončno vrsto

$$\psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{4\pi} + \frac{15}{8\pi} b_{ij} f_{ij}(\mathbf{p}) + \frac{315}{32\pi} b_{ijkl} f_{ijkl}(\mathbf{p}) + \dots, \quad (12)$$

kjer sta  $b_{ij}$  in  $b_{ijkl}$  deviatorja tenzorjev orientacije

$$b_{ij} = a_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij}, \quad (13)$$

$$b_{ijkl} = a_{ijkl} - \frac{1}{7} (\delta_{ij} a_{kl} + \delta_{ik} a_{jl} + \delta_{il} a_{jk} + \delta_{kl} a_{ij} + \delta_{jl} a_{ik} + \delta_{jk} a_{il}) + \frac{1}{35} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (14)$$

tenzorja  $f_{ij}$  in  $f_{ijkl}$  pa sta definirana kot

$$f_{ij}(\mathbf{p}) = p_i p_j - \frac{1}{3} \delta_{ij}, \quad (15)$$

$$f_{ijkl}(\mathbf{p}) = p_i p_j p_k p_l - \frac{1}{7} (\delta_{ij} p_k p_l + \delta_{ik} p_j p_l + \delta_{il} p_j p_k + \delta_{kl} p_i p_j + \delta_{jl} p_i p_k + \delta_{jk} p_i p_l) + \frac{1}{35} (\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (16)$$

Težava tega pristopa je v neskončnosti vrste, zaradi česar točna določitev ODF ni možna. V praksi se najpogosteje uporablja rekonstrukcija samo z zapisanimi tremi členi, pri čemer pa se tenzor  $a_{ijkl}$  aproksimira s tenzorjem orientacije drugega reda  $a_{ij}$ .

Drugi način rekonstrukcije je načeloma možen tudi preko enačb, ki sledijo iz osnovne enačbe za popis gibanja posameznega vlakna [3]

$$\dot{p}_i = -\frac{1}{2} \omega_{ij} p_j + \frac{1}{2} \lambda (\dot{\gamma}_{ij} p_j - \dot{\gamma}_{kl} p_k p_l p_i) - \frac{D_r}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{p}}, \quad (17)$$

kjer je  $\omega_{ij} = \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$  tenzor vrtinčnosti,  $v_i$  je vektor hitrosti,  $\dot{\gamma}_{ij} = \frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$  je tenzor hitrosti deformacije,  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}$  je gradientni operator na površini enotske krogle in  $\lambda = (r_e^2 - 1)/(r_e^2 + 1)$  je materialni parameter, kjer je  $r_e$  razmerje med dolžino  $l$  in premerom  $d$  vlakna. Člen  $D_r = C_I \dot{\gamma}$  upošteva interakcijo med vlakni, kjer je  $C_I$  interakcijski koeficient,  $\dot{\gamma} = \sqrt{\dot{\gamma}_{ij} \dot{\gamma}_{ji}/2}$  pa velikost  $\dot{\gamma}_{ij}$ . S kombinacijo te enačbe s kontinuitetno enačbo [1]

$$\frac{D\psi}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (\psi \dot{\mathbf{p}}), \quad (18)$$

dobimo enačbo za evolucijo ODF pri gibanju vlaken v talini polimera [3]

$$\begin{aligned} \frac{D\psi}{Dt} = D_r \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} + \frac{D_r}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \left( D_r \frac{\cos \theta}{\sin \theta} - \lambda^- \boldsymbol{\kappa}^T : \delta_r \delta_\theta - \lambda^+ \boldsymbol{\kappa} : \delta_r \delta_\theta \right) + \\ + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \left( \lambda^- \boldsymbol{\kappa}^T : \delta_r \delta_\phi - \lambda^+ \boldsymbol{\kappa} : \delta_r \delta_\phi \right) + \psi (3\lambda \boldsymbol{\kappa} : \delta_r \delta_r), \end{aligned} \quad (19)$$

kjer je  $\boldsymbol{\kappa}$  tenzor gradienta hitrosti,  $\kappa_{ij} = (\partial v_i / \partial x_j)$ ,  $\delta_r$ ,  $\delta_\theta$  in  $\delta_\phi$  so enotski vektorji v sferičnih koordinatah,  $\lambda^+ = \lambda + 1/2$  in  $\lambda^- = \lambda - 1/2$  pa sta pomožni konstanti. Enačba predstavlja parcialno diferencialno enačbo za  $\psi = \psi(t, \theta, \phi)$ , torej popisuje porazdelitev verjetnosti orientacije za vsak časovni trenutek razvoja orientacije med gibanjem vlaken v talini polimera  $t$  v dani materialni točki  $\mathbf{x}$ . Omeniti velja, da analitično ta enačba ni rešljiva, njeno numerično reševanje pa je zamudno in se uporablja samo za preverjanje pravilnosti aproksimacij tenzorjev orientacije.

## 2.2 Evolucijska enačba za orientiranost vlaken

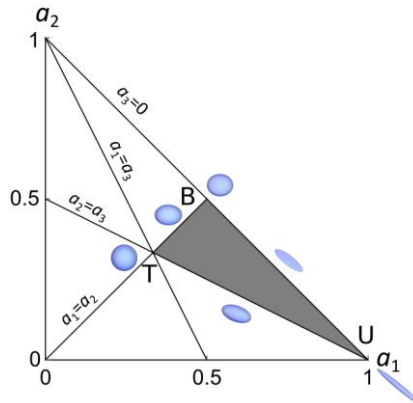
S kombiniranjem enačb (2) in (17) dobimo parcialno diferencialno enačbo za  $a_{ij}$ , ki popisuje razvoj tenzorja orientacije vlaken drugega reda pri danem hitrostnem polju polimerne taline [1]

$$\frac{Da_{ij}}{Dt} = -\frac{1}{2}(\omega_{ik}a_{kj} - a_{ik}\omega_{kj}) + \frac{1}{2}\lambda(\dot{\gamma}_{ik}a_{kj} - a_{ik}\dot{\gamma}_{kj} - 2\dot{\gamma}_{kl}a_{ijkl}) + 2C_I\dot{\gamma}(\delta_{ij} - 3a_{ij}) \quad (20)$$

Ta enačba je računsko manj zahtevna, a v njej nastopa tudi tenzor orientacije četrtega reda. Če želimo zapisati enačbo v zaključeni obliki, je treba tenzor orientacije četrtega reda izraziti s tenzorjem drugega reda,  $a_{ijkl} = a_{ijkl}(a_{ij})$ . V ta namen obstajajo številne aproksimacije, ki so bile večinoma dobljene kot polinomska aproksimacija rešitev enačbe (19) za različne tokove fluida [1, 3].

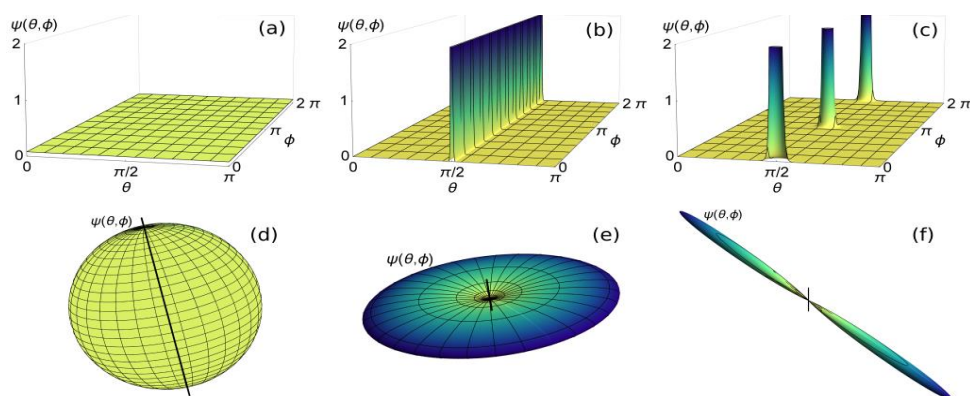
## 3 Definicija nove oblike ODF

Za razliko od zapisanih pristopov pa smo se mi vprašali, kakšno obliko funkcije ODF  $\psi = \psi(\theta, \phi)$  lahko predpostavimo, da bo ta ustrezen nadomestek (v splošnem neznane) funkcije. Izhajali smo iz pregleda vseh možnih stanj orientacij v določeni materialni točki. Če lastne vrednosti tenzorja orientacij drugega reda uredimo po velikosti  $a_1 \geq a_2 \geq a_3$ , se vsa možna stanja nahajajo v sivem trikotniku slike 2. V točki U so vsa vlakna usmerjena v isto smer, v točki T so razporejena v vse tri smeri enakomerno (naključna razporeditev), v točki B pa so orientirana enakomerno v eni ravnini. Stanja na robu predstavljajo vmesno stanje med pripadajočim parom skrajnih stanj, stanje v sivem področju pa je kombinacija vseh treh skrajnih stanj.



Slika 2: Lokacija vseh možnih stanj orientiranosti [7].

Za skrajna stanja T, B in U vrednosti funkcije  $\psi(\theta, \phi)$  privzamemo kot znane, če upoštevamo porazdelitev vlaken skladno s principom maksimalne entropije [6]. Slike 3a-c prikazujejo vrednosti funkcije v kartezijevih koordinatah: v točki T je  $\psi(\theta, \phi)$  konstantna, ker so vlakna razporejena naključno in je verjetnost za vse smeri enaka; v točki B so vsa vlakna razporejena v ravnini, torej je funkcija povsod nič, razen pri  $\theta = \pi/2$ ; v točki C pa so vsa vlakna poravnana v isto smer, torej jih najdemo samo pri vrednostih  $(\theta, \phi) = (\frac{\pi}{2}, 0)$  in  $(\theta, \phi) = (\frac{\pi}{2}, \pi)$ .



**Slika 3:** ODF v skrajnih stanjih: v Kartezijevih koordinatah a) točka T, b) točka B, c) točka U; v sferičnih koordinatah d) točka T, e) točka B, f) točka U [7].

Slike 3d-f pa prikazujejo vrednosti funkcije za ista stanja v sferičnih koordinatah. Hipoteza našega pristopa je, da je možno definirati takšno funkcijo, pri kateri s spremembo parametrov prehajamo iz enega stanja v drugega, s tem pa pokrijemo še vsa vmesna stanja. Najustreznejša se nam je zdela funkcija, ki v sferičnih koordinatah popisuje na ekvatorju zožan elipsoid, katerega lahko definiramo kot oddaljenost od izhodišča na potenco razmerja polos elipsoida. Aproximativno funkcijo za ODF smo tako zapisali kot

$$\psi_a = R^{\frac{a}{c}}, \quad (21)$$

kjer so polosi elipsoida  $a \geq b \geq c \geq 0$ . Elipsoid v kartezičnih koordinatah  $\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 = 1$  transformiramo v sferične z enačbami  $x = R \sin \theta \cos \phi$ ,  $y = R \sin \theta \sin \phi$ ,  $z = R \cos \theta$ , od koder sledi sferični radij

$$R(\theta, \phi) = \frac{a}{\sqrt{1 - (\sin \theta \sin \phi)^2 \left(1 - \left(\frac{a}{b}\right)^2\right) - \cos^2 \theta \left(1 - \left(\frac{a}{c}\right)^2\right)}} \quad (22)$$

Če uvedemo dva parametra  $q$  in  $r$  kot oblikovni razmerji elipsoida  $q = c/b$ ,  $r = b/a$ , velja  $0 \leq q \leq 1$  in  $0 \leq r \leq 1$ . Enačba (22) se preoblikuje v

$$R(\theta, \phi) = b (r^2 + (\sin \theta \sin \phi)^2 (1 - r^2) - (\cos \theta)^2 (r^2 - q^{-2}))^{-\frac{1}{2}} \quad (23)$$

Izraz uporabimo v osnovni definiciji (21) in po ureditvi dobimo

$$\psi_a(\theta, \phi, q, r) = C (r^2 + (\sin \theta \sin \phi)^2 (1 - r^2) - (\cos \theta)^2 (r^2 - q^{-2}))^{-\frac{1}{2qr}} \quad (24)$$

pri čemer  $C = C(q, r)$  dobimo iz normalizacije  $\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \psi_a(\theta, \phi, q, r) \sin \theta d\theta d\phi = 1$ .

Definirana dvoparametrična ODF  $\psi_a(q, r)$  je definirana za vsa stanja sivega trikotnika slike 2 in je torej monotona za poljuben  $q$  in  $r$  (ne oscilira).

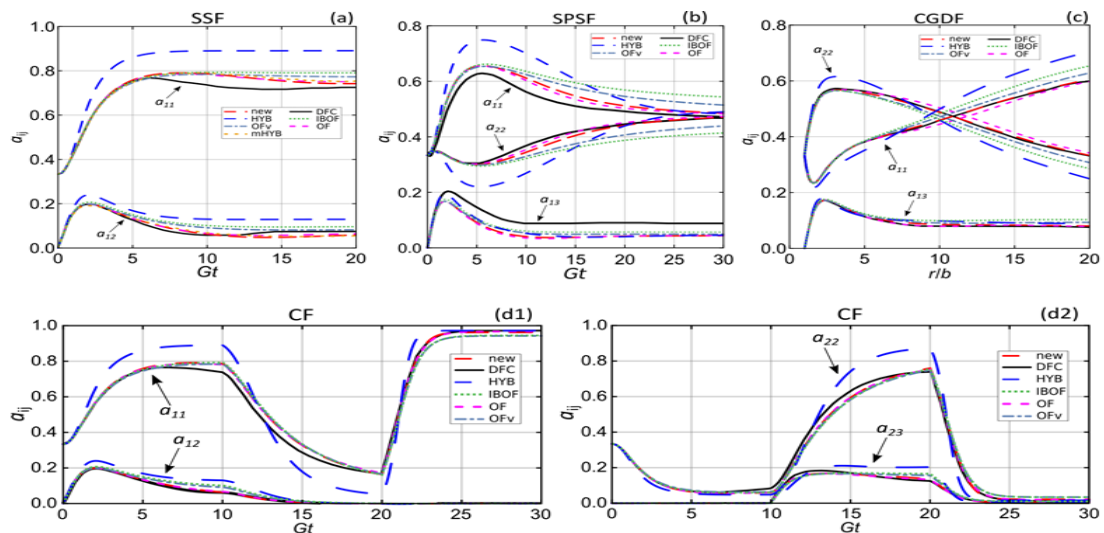
#### 4 Aproksimacija tenzorja orientacije četrtega reda

V nadaljevanju si bomo ogledali, kako lahko s pomočjo izpeljane ODF (24) izračunamo komponente tenzorja orientacije četrtega reda  $a_{ijkl}$ , če imamo znane komponente tenzorja orientacije drugega reda  $a_{ij}$ , saj je to običajno edini podatek, ki ga dobimo iz simulacije brizganja. Za izbrane pare parametrov  $(q, r)$ , ki se razprostirajo preko celotnega definicijskega območja obeh parametrov, smo s pomočjo enačb (4)-(11) in uporabe ODF (24) enolično izračunali množico diskretnih vrednosti komponent obeh tenzorjev  $a_{ij} = a_{ij}(q, r)$  in  $a_{ijkl} = a_{ijkl}(q, r)$ . S tem, ko poznamo vrednosti vseh komponent obeh tenzorjev za vsak par  $(q, r)$ , lahko vzpostavimo neposredno zvezo  $a_{ijkl}(a_1, a_2)$ . V ta namen uporabimo polinomske aproksimacije

$$a_{ijkl}(a_1, a_2) = c_1 + c_2 a_1 + c_3 a_1^2 + c_4 a_1^3 + c_5 a_1^4 + c_6 a_2 + c_7 a_1 a_2 + c_8 a_1^2 a_2 + c_9 a_1^3 a_2 + c_{10} a_2^2 + c_{11} a_1 a_2^2 + c_{12} a_1^2 a_2^2 + c_{13} a_2^3 + c_{14} a_1 a_2^3 + c_{15} a_2^4, \quad (25)$$

s čimer smo rezultate metode predstavili v povsem enaki obliki, kot je znana iz literature. Tabela koeficientov, ki smo jih izračunali, je prikazana v [7].

Ustreznost pristopa in ODF smo verificirali tako, da smo analizirali razvoj orientacije vlaken  $a_{ij}(a_1, a_2)$  pri različnih tipih tokov fluida [3] in rezultate primerjali s različnimi aproksimacijami iz literature ter rezultati reševanja diferencialne enačbe (19). Natančnejši podatki o parametrih tokov in aproksimacijah so prikazani v [7]. Slika 4 prikazuje primerjavo rezultatov različnih metod za nekaj tokov. Ujemanje naših krivulj ("new") je primerljivo z ostalimi, pri čemer za razliko od ostalih metod naša aproksimacija ni kalibrirana na rešitvi diferencialne enačbe (19), ampak je zgolj posledica predpostavljene oblike ODF.

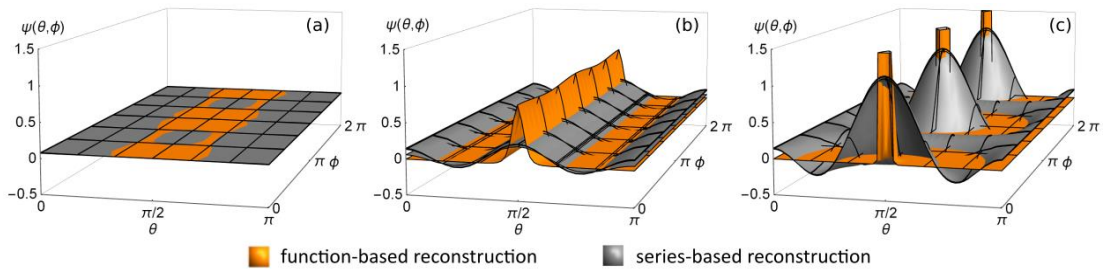


**Slika 4:** Primerjava komponent  $a_{ij}$  s "točno" (DFC, en. (19)) pri različnih tokovih, izračunanih z novo in najpogosteje uporabljenimi metodami. (a) enostavni strižni tok, (b) strižni/ravninski tok, (c) radialni ravninski tok, (d1) kombinirani tok 1 in (d2) kombinirani tok 2 [7]. Abscisna os vseh grafov predstavlja psevdočas, za pomen gl. [7].



## 5 Rekonstrukcija ODF

V začetku smo opisali, kako se rekonstrukcija ODF izvede po metodi sferičnih harmonikov. Pri našem pristopu pa lahko vzpostavimo bijektivno preslikavo med dvoparametrskima ODF  $\psi_a(q, r)$  in  $a_{ij}(a_1, a_2)$ . Prej smo opisali, da smo za množico diskretnih parov  $(q, r)$  izračunali pripadajoče vrednosti  $(a_1, a_2)$ . Z enakim pristopom kot za določitev  $a_{ijkl}$ , enačba (25), smo izvedli polinomske aproksimacije za  $q(a_1, a_2)$  oz.  $r(a_1, a_2)$ . Koefficienti  $c_i$  za  $q$  in  $r$  so prikazani v [7]; slika 5 pa prikazuje primerjavo rekonstrukcij ODF po štirih obstoječih metodah (sive krivulje) z našo rekonstrukcijo (oranžne krivulje).



**Slika 5:** Primerjava uspešnosti rekonstrukcije ODF. a) točka T, b) točka B, c) točka U [7].

Rekonstrukcijo smo izvedli v skrajnih točkah T, B in U, kjer prave vrednosti porazdelitve ODF poznamo. Iz primerjav rekonstrukcij vidimo (slika 3a-c), da se nova metoda bolj približa pravi vrednostim, predvsem pa ne vsebuje oscilacij in negativnih vrednosti.

## 6 Zaključek

Komercialni programi za simulacije injekcijskega brizganja popisujejo orientacijo vlaken med brizganjem in po njem s tenzorjem orientacije drugega reda. Rekonstrukcijo ODF danes največkrat izvajajo z metodo sferičnih harmonikov, a ta pristop lahko vodi do nefizikalnih in nenatačnih vrednosti, še posebej v skrajnih stanjih orientacije. V prispevku smo prikazali novo definirano ODF, na njeni osnovi polinomske aproksimacije tenzorja orientacije četrtega reda ter rekonstrukcijo ODF iz znanih vrednosti tenzorja orientacije drugega reda. Pokazali smo, da je predpostavka oblike priščipnjene elipsoida v sferičnem koordinatnem sistemu dovolj, da lahko takšna funkcija brez dodatnega kalibriranja napove evolucijo komponent tenzorja orientacije drugega reda vsaj tako dobro kot obstoječe metode. Pri rekonstrukciji ODF iz komponent tenzorja orientacije drugega reda se pa celo izkaže, da funkcijski pristop rekonstrukcije po novem predlogu bistveno natančneje rekonstruira ODF kot metoda sferičnih harmonikov.

## Literatura

- [1] S. G. Advani, C. L. Tucker, *The Use of Tensors to Describe and Predict Fiber Orientation in Short Fiber Composites*, J. Rheol., 31/8, 751–784, 1987.
- [2] K. Breuer, M. Stommel, W. Korte, *Analysis and Evaluation of Fiber Orientation Reconstruction Methods*, J. Compos. Sci., 3/3, 67, 2019.
- [3] J. S. Cintra, C. L. Tucker, *Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation*, J. Rheol., 39/6, 1095–1122, 1995.
- [4] I. Doghri, L. Tinel, *Micromechanics of inelastic composites with misaligned inclusions: Numerical treatment of orientation*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 195, 13–16, 1387–1406, 2006.
- [5] A. Launay, Y. Marco, M. H. Maitournam, I. Raoul, *Constitutive behavior of injection molded short glass fiber reinforced thermoplastics: a phenomenological approach*, Procedia Eng, 10, 2003–2008, 2011.
- [6] V. Müller, T. Böhlke, *Prediction of effective elastic properties of fiber reinforced composites using fiber orientation tensors*, Compos. Sci. Technol., 130, 36–45, 2016.
- [7] M. Nabergoj, J. Urevc, M. Halilovič, *Function-based reconstruction of the fiber orientation distribution function of short-fiber-reinforced polymers*, J. Rheol, 66, 147, 2022
- [8] E. T. Onat, F. A. Leckie, *Representation of Mechanical Behavior in the Presence of Changing Internal Structure*, J. Appl. Mech., 55/1, 1–10, 1988.
- [9] R. Pietrogrande, P. A. Carraro, M. De Monte, and M. Quaresimin, *A novel pseudo-grain approach for the estimation of the elastic stress distributions within the matrix of short fiber-reinforced polymers*, Composites Part B, 150, 115–123, 2018.



## *Razvoj digitalnih dvojčkov za namen identifikacije poškodovanosti strukture z metodami strojnega učenja*

Tim Vrtač<sup>1</sup>, Gregor Čepon<sup>1</sup> in Miha Boltežar<sup>1</sup>

### *Development of digital twins for structural damage identification using machine learning methods,*

**Povzetek.** Na področju spremljanja poškodovanosti naprav in struktur se v zadnjem času učinkovito združujejo metode strukturne dinamike, vibracijske poškodovanosti in metode strojnega učenja. Čeprav strojno učenje trenutno dosega pomembne uspehe pri diagnostiki napak strojev, je njegova uspešnost podvržena predpostavki, da obstaja dovolj klasificiranih podatkov za vzpostavitev diagnostičnih modelov. Izkazuje se, da je zbiranje zadostnega števila realnih vzorcev pogosto zamudno in zahtevno, zato se pojavljajo potrebe po alternativnih pristopih generacije učne množice. V tem delu je predstavljen alternativni pristop, ki temelji na integraciji digitalnih dvojčkov za fizikalno vodeno usposabljanje klasifikatorjev strojnega učenja, pri čemer se osredotočimo na simuliranje poškodovanosti na spojih med komponentami strukture. Tukaj metodologija podstrukturiranja predstavlja obetaven inženirski koncept, saj omogoča neodvisno simulacijo poškodb, tako na ravni komponent, kot tudi z vidika poškodb v spojih med njimi.

**Abstract.** In recent times, methods of structural dynamics, vibrational damage, and machine learning methods are being efficiently combined in the field of structural health monitoring. Although machine learning has achieved important improvements in machine damage diagnosis, its success strongly depends on the sufficient amount of learning data to build reliable diagnostic models. Collecting a sufficient number of real samples often proves to be time-consuming and demanding. Therefore, alternative approaches for the generation of datasets are being developed. This work proposes an approach, which is based on the integration of digital twins in order to enable physics-guided training of machine learning classifiers, where we focus on the simulation of damage to joints between structure's components. The substructuring methodology represents a promising engineering concept as it enables independent damage simulation, at the component level as well as in the joints between components.

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

## 1 Uvod

Napredek v računalniški tehniki je omogočil razvoj naprednih metod strojnega učenja, ki so se pričele pospešeno uporabljati tudi na področju strukturne dinamike. Uspešnost metod strojnega učenja je pogojena z verodostojnostjo učne množice, ki okarakterizira naravo problema. Poškodovanost strukture se lahko ovrednoti na osnovi dinamskega odziva. Dinamski odziv strukture je moč popisati v obliki frekvenčno prenosnih funkcij, katerih lastnosti se spreminjajo glede na lokacijo in stopnjo poškodovanosti strukture. Čeprav strojno učenje omogoča uspehe pri diagnostiki poškodovanosti naprav, je uspešnost detekcije pogojena s predpostavko, da obstaja dovolj klasificiranih podatkov za vzpostavitev veljavnih diagnostičnih modelov. Zato je izziv na tem področju razviti metodologijo, ki bi omogočila generiranje reprezentativnih učnih podatkovnih nizov v virtualnem okolju z uporabo digitalnih dvojčkov. Prognostika zahteva veliko količino učnih podatkov, ki se navezujejo na poškodobena stanja naprav. Ker stroji običajno delujejo brez okvar, je na voljo veliko podatkov o stanju naprave med ustreznim obratovanjem, medtem ko je podatkov v obratovanju v fazi okvar premalo za učinkovit proces učenja modelov. Iz tega razloga se pojavijo potrebe po alternativnih pristopih pridobivanja učnih podatkov. Glede na to, da niti pristop s fizikalnim modelom, niti s podatkovnim modelom strojnega učenja nista zadostna za kompleksno diagnosticiranje stanja strukture, se je v zadnjih nekaj letih razvila ideja o njeni integraciji [5]. Pomemben korak na tem področju sta napravila Ritto in Rochinha [5], ki sta zasnovala digitalni dvojček za simulacijo različnih scenarijev poškodbe v virtualnem okolju. To omogoča večjo učinkovitost pridobivanja učnih podatkov, vendar pa je postopek omejen na semi-analitične modele. V prispevku je predstavljen postopek razvoja digitalnih dvojčkov preko uporabe pristopov dinamskega podstrukturiranja. Razvoj dinamskega podstrukturiranja omogoča kombiniranje kompleksnih podstruktur, ki so lahko definirane v eksperimentalni oz. numerični domeni [2]. Kot je prikazano v tem prispevku ima ta pristop potencial, da izboljša proces učenja modelov strojnega učenja in s tem izboljša učinkovitost detekcije lokacije in stopnje poškodovanosti struktur.

## 2 Teoretična izhodišča

### 2.1 Dinamsko sklapljanje v frekvenčni domeni (FBS)

Izhodišče za sklapljanje podstruktur predstavlja gibalna enačba nesklopljenega sistema v frekvenčni domeni:

$$\mathbf{u}(\omega) = \mathbf{Y}(\mathbf{f}(\omega) + \mathbf{g}(\omega)). \quad (1)$$

Enačba (1) povezuje odzive  $\mathbf{u}(\omega)$  na prostostnih stopnjah podstruktur z vzbujanji v obliki zunanjih sil  $\mathbf{f}(\omega)$  in kontaktnih sil med podstrukturami  $\mathbf{g}(\omega)$  preko admitančne matrike nesklopljenega sistema  $\mathbf{Y}(\omega)$ <sup>2</sup>. Slednjo sestavljata blok-diagonalno postavljeni admitančni matriki podstruktur A in B:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \mathbf{Y}^{(A)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Y}^{(B)} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

---

<sup>2</sup> V nadaljevanju se zavoljo preglednosti notacije omejimo na sklapljanje dveh podstruktur A in B.

V procesu sklapljanja na kontakt med podstrukturama vsilimo dva pogoja. Kompatibilnostni pogoj predpostavi enakost pomikov kontaktnih prostostnih stopenj:

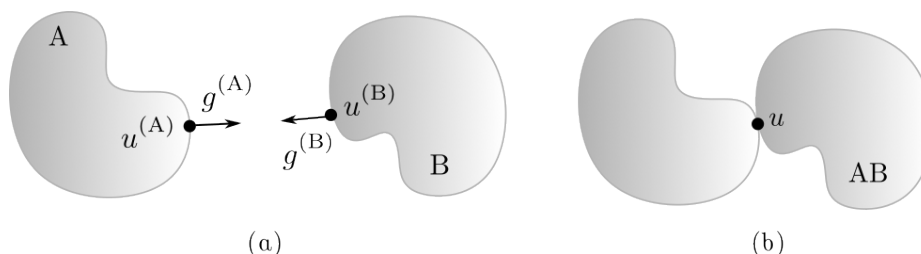
$$\mathbf{B}u = \mathbf{0}, \quad (3)$$

kjer je  $\mathbf{B}$  Boolova matrika, ki poveže soležne pare kontaktnih prostostnih stopenj tako, da je razlika pomikov znotraj vsakega para enaka 0. Ravnotežni pogoj predpostavi ravnotežje kontaktnih sil:

$$\mathbf{L}^T \mathbf{g}(\omega) = \mathbf{0}, \quad (4)$$

kar soležne pare kontaktnih sil  $\mathbf{g}(\omega)$  poveže preko matrike  $\mathbf{L}$  tako, da so njihove vsote enake 0. De Klerk s sodelavci [4] je pokazal, da ravnotežni pogoj lahko poenostavimo z vpeljavo vektorja Lagrangevih množiteljev  $\lambda$ , ki upošteva, da sta kontaktni sili v paru po velikosti enaki, vendar nasprotno predznačeni ( $g^{(A)} = -g^{(B)} = \lambda$ , slika 1). Ob upoštevanju te poenostavitve iz enačb (1) - (4) izpeljemo admitanco sklopljenega sistema  $\tilde{\mathbf{Y}}$ :

$$\tilde{\mathbf{Y}} = [\mathbf{I} - \mathbf{YB}^T(\mathbf{BYB}^T)^{-1}\mathbf{B}] \mathbf{Y}. \quad (5)$$



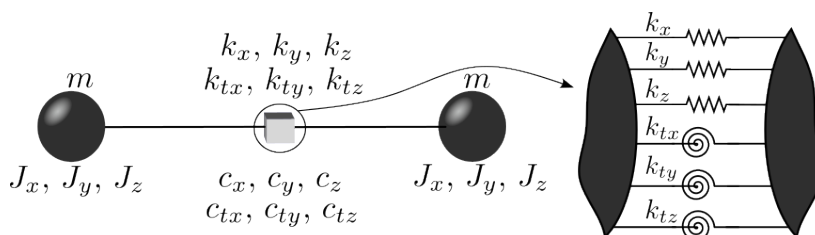
Slika 1: Postopek sklapljanja dveh struktur: a) strukturi A in B, b) sklopljen sistem.

## 2.2 Fizikalni model spoja

Spoj med podstrukturami modeliramo kot dve masni točki, medsebojno povezani z linearnimi vzmetmi in viskozni dušilkami, kar dopušča deformabilnost na kontaktu med podstrukturami. Omenjeni model ima tako 12 prostostnih stopenj in je shematsko prikazan na sliki 2.

Fizikalni model spoja je definiran preko masne  $\mathbf{M}^{(J)}$ , dušilne  $\mathbf{C}^{(J)}$  in togostne matrike  $\mathbf{K}^{(J)}$ :

$$\mathbf{M}^{(J)} = \begin{bmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{M} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{C}^{(J)} = \begin{bmatrix} \mathbf{C} & -\mathbf{C} \\ -\mathbf{C} & \mathbf{C} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{K}^{(J)} = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & -\mathbf{K} \\ -\mathbf{K} & \mathbf{K} \end{bmatrix}. \quad (6)$$



Slika 2: Model spoja.

Pri tem je  $\mathbf{M}$  diagonalna masna matrika posamezne masne točke ( $\mathbf{M} = \text{diag}(m, m, m, J_x, J_y, J_z)$ ). Dušilno matriko  $\mathbf{C}$  sestavljajo koeficienti dušenja v 6 prostostnih stopnjah ( $\mathbf{C} = \text{diag}(c_x, c_y, c_z, c_{tx}, c_{ty}, c_{tz})$ ), togostno matriko  $\mathbf{K}$  pa trije translatorski in trije rotacijski togostni koeficienti ( $\mathbf{K} = \text{diag}(k_x, k_y, k_z, k_{tx}, k_{ty}, k_{tz})$ ).

Poznane masne, dušilne in togostne matrike omogočajo določitev admitančne matrike spoja  $\mathbf{Y}^{(J)}$  velikosti  $12 \times 12$  po naslednji enačbi [6]:

$$\mathbf{Y}^{(J)} = \left[ -\mathbf{M}^{(J)}\omega^2 + \mathbf{C}^{(J)}i\omega + \mathbf{K}^{(J)} \right]^{-1}. \quad (7)$$

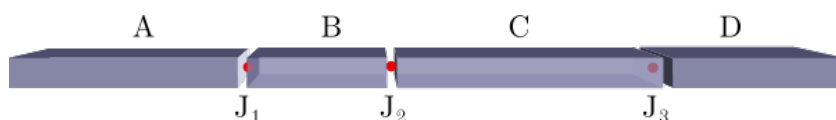
### 2.3 Poškodovanost spoja

Poškodovanost spoja opredelimo preko padca togosti spoja [5]. Obseg definiramo s faktorjem  $\beta$ , ki predstavlja povezavo med togostno matriko poškodovanega spoja  $\mathbf{K}'$  in togostno matriko nepoškodovanega spoja  $\mathbf{K}_0$ :

$$\mathbf{K}' = \beta \mathbf{K}_0. \quad (8)$$

## 3 Metode dela - numerična simulacija

Obravnavamo strukturo, ki jo sestavljajo štiri aluminijasti nosilci (komponente A, B, C in D na sliki 3), spojeni preko treh spojev ( $J_1$ ,  $J_2$  in  $J_3$ ). Podstrukture so pri tem paroma enake. A in C sta kvadra velikosti  $100 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ , B in D pa kvadra velikosti  $50 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ .

Slika 3: Struktura sestavljena iz elementov A, B, C in D povezanih s spoji  $J_1$ ,  $J_2$  in  $J_3$ .

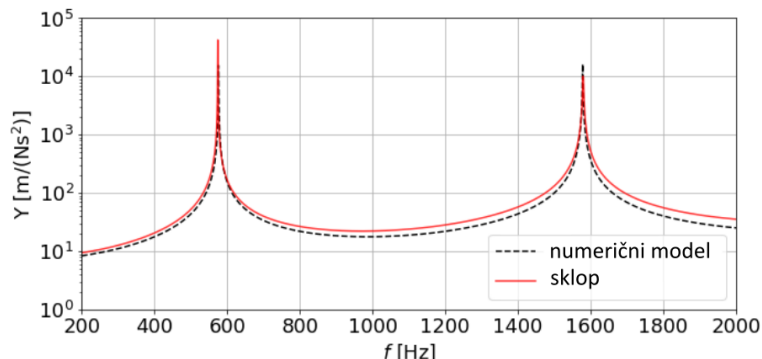
Za posamezne komponente sestava smo izdelali numerične modele ter izvedli modalno analizo po metodi končnih elementov v programu *Ansys*. Rezultate smo uporabili v programskem jeziku *Python*, kjer z uporabo modula za frekvenčno podstrukturiranje *pyFBS* [1] določimo frekvenčne prenosne funkcije komponent urejene v admitančne matrike  $\mathbf{Y}^{(A)}$ ,  $\mathbf{Y}^{(B)}$ ,  $\mathbf{Y}^{(C)}$  in  $\mathbf{Y}^{(D)}$ .

Admitančne matrike komponent so za celoten nabor učnih podatkov enake, saj smo predpostavili, da se poškodbe pojavijo zgolj na spojih med podstrukturami.

V nadaljevanju postopka tvorbe učnih podatkov oblikujemo nabor admitančnih matrik različno poškodovanih spojev. Za posamezen vzorec potrebujemo modele vseh treh spojev. Predpostavimo, da se poškodba hkrati lahko nahaja zgolj na enem spoju hkrati, kar pomeni, da dvema spojema priredimo nominalne vrednosti togosti, ki pripadajo nepoškodovani strukturi, tretjemu spoju pa priredimo faktor padca togosti  $\beta$  z vrednostjo v intervalu med 0 % in 50 %, pri čemer je  $\beta$  enakomerno porazdeljena naključna spremenljivka.

Pripadajoče poškodovanosti smo razdelili v 5 razredov velikosti 10 % padca togosti. Na ta način dobimo 15 možnih kombinacij lokacije in obsega poškodbe, ki predstavljajo izhodne razrede klasifikacijskega problema. Na ta način smo tvorili 450 učnih podatkov, kar pomeni 30 učnih podatkov na posamezen razred. Polovico teh podatkov smo uporabili za učenje modela strojnega učenja, polovico pa za testiranje klasifikatorja.

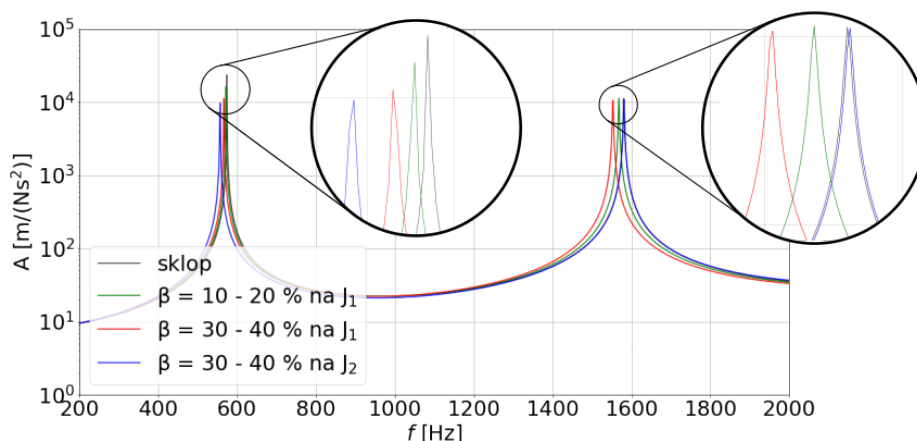
Pred začetkom tvorjenja učne domene določimo togosti spojev nepoškodovane strukture. To izvedemo tako, da primerjamo oba modela (slika 4): numerični model predstavlja dinamski odziv, ki ga dobimo na osnovi numerične simulacije celotne strukture v *Ansysu*, drugi model pa je rezultat sklopa numeričnih modelov podstruktur. Iz slike 4 je razvidno, da se frekvenčni prenosni funkciji, ki jo dobimo s sklopom podstruktur, dobro ujemata v poziciji lastnih frekvenc, v amplitudah pa se pojavijo določena odstopanja. Le ta so posledica nenatančne identifikacije parametrov spoja oz. preveč poenostavljenega analitičnega modela spoja.



**Slika 4:** Primerjava frekvenčne prenosne funkcije, pridobljene z numerično simulacijo celotne strukture, s frekvenčno prenosno funkcijo, dobljeno s sklopom numeričnih modelov podstruktur.

V nadaljevanju preverimo vpliv obsega in lokacije poškodb na dinamske odzive strukture, tako da sklopimo numerične modele podstruktur preko spojev z različnimi parametri togosti, kar simulira poškodbe na spojih. Iz celotnega nabora učnih podatkov izberemo 3 vzorce, ki so prikazani na sliki 5. V splošnem se poškodba odraža v padcu lastnih frekvenc strukture, velikost padca posamezne lastne frekvence pa je odvisna od obsega in lokacije poškodbe. Ko opazujemo poškodbi na spoju  $J_1$ , vidimo, da vplivata predvsem na drugo lastno frekvenco, pri čemer padec lastne frekvence raste s stopnjo poškodovanosti spoja. Nadalje primerjamo še poškodbi na

spojih  $J_1$  in  $J_2$  pri enakih stopnjah poškodovanosti. Opazimo, da ima padec togosti na prvem spoju večji vpliv na drugo lastno frekvenco, medtem, ko ima padec togosti na prvem spoju večji vpliv na prvo lastno frekvenco. Iz tega sklepamo, da je dinamski odziv spremenjene strukture primeren tako za določanje lokacije kot tudi stopnje poškodovanosti.



**Slika 5:** Vpliv poškodbe spojev  $J_1$  in  $J_2$  na frekvenčno prenosno funkcijo strukture.

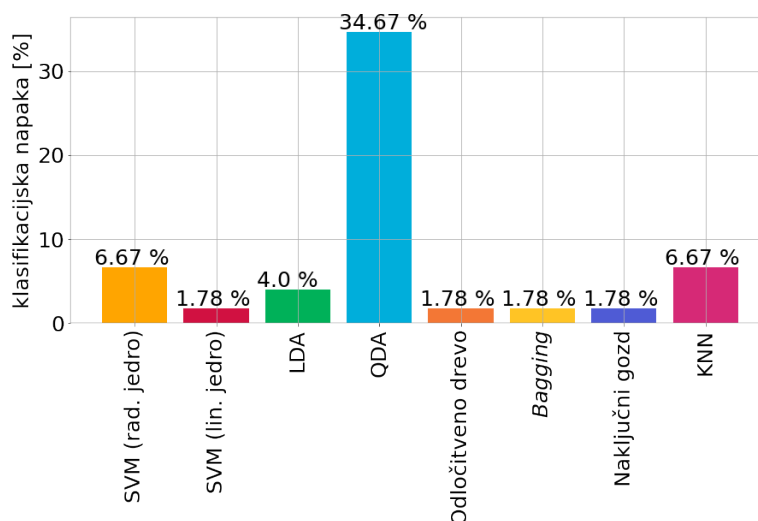
V numeričnem primeru za učne podatke neposredno vstavljamo frekvenčne prenosne funkcije. S tem v model strojnega učenja vnašamo relativno velike količine podatkov za posamezen vzorec, zato je učenje dokaj zamudno, še posebej pri velikem številu vzorcev.

## 4 Rezultati

Tvorjene učne podatke smo uporabili za učenje in evaluacijo različnih klasifikacijskih modelov strojnega učenja. Uporabljene so bile metoda podpornih vektorjev (SVM), linearna diskriminantna analiza (LDA), kvadratna diskriminantna analiza (QDA), metoda odločitvenih dreves in ansambelski metodi *bagging* in naključni gozdovi ter metoda K-najbližjih sosedov (KNN) [3]. Različni klasifikatorji pri omejenem številu vhodnih podatkov izkazujejo različne stopnje uspešnosti pri napovedovanju stopnje in lokacije poškodovanosti. Klasifikacijske napake po posameznih metodah so predstavljene na sliki 6.

Izkaže se, da že pri nizkem številu učnih podatkov določene metode relativno dobro predvidijo stopnjo in lokacijo poškodovanosti za nepoznane vhodne podatke, kar nakazuje na jasne meje med podatki posameznih razredov. Dober uspeh dosegajo linearne metode (LDA, SVM z linearnim jedrom) in neparametrične metode (odločitveno drevo, *bagging* in naključni gozdovi ter KNN). Kot slab klasifikator za obravnavani problem pa najbolj izstopa metoda QDA, kar je posledica linearnih meja med podatki.





**Slika 6:** Klasifikacijska napaka pri določanju lokacije in stopnje poškodovanosti strukture za različne metode strojnega učenja.

## 5 Zaključek

Z numeričnim eksperimentom smo pokazali, da dinamsko podstrukturiranje omogoča tvorjenje učnih podatkov v obliki frekvenčnih prenosnih funkcij za učenje različnih klasifikatorjev za identifikacijo poškodb na spojih strukture. Pomembna prednost tovrstnega pristopa je, da omogoča povezovanje kompleksnih modelov podstruktur preko enostavnih modelov spojev. Ker so modeli podstruktur za vse vzorce enaki in različne poškodovanosti določajo zgolj parametri spojev, tvorjenje širokega nabora učnih vzorcev poteka hitro in učinkovito. Iz rezultatov simulacije vidimo, da kljub relativno nizkemu številu učnih podatkov, različne metode strojnega učenja omogočajo napovedovanje tako lokacije, kot tudi obsega poškodb na spojih z visoko stopnjo zanesljivosti.

## Literatura

- [1] T. Bregar, A. El Mahmoudi, M. Kodrič, D. Ocepek, F. Trainotti, M. Pogačar, M. Göldeli, G. Čepon, M. Boltežar, and D. J. Rixen. *pyFBS: A Python package for Frequency Based Substructuring*. *The Journal of Open Source Software*, 7(69), 2022.
- [2] D. de Klerk, D. J. Rixen, and S. N. Voormeeren. *General Framework for Dynamic Substructuring: History, Review, and Classification of Techniques*. *AIAA Journal*, 46(5):1169–1181, 2008.
- [3] G. James, D. Witten, T. Hastie, and R. Tibshirani. *An introduction to statistical learning: with applications in R*. Springer, New York, Heidelberg, Dordrecht, London, 2. edition, 2021.

- [4] D. Klerk, D. Rixen, and J. de Jong. The frequency based substructuring method reformulated according to the dual domain decomposition method. In *A conference & Exposition on Structural Dynamics*, pages 1–14. IMAC, 2006.
- [5] T. G. Ritto and F. A. Rochinha. *Digital Twin, physics-based model, and machine learning applied to damage detection in structures. Mechanical Systems and Signal Processing*, 155, 2021.
- [6] M. van der Seijs. *Dynamic Substructuring: Analysis and Design Strategies for Vehicle Development*. PhD thesis, Delft University of Technology, Delft, 2016.



## *Numerical analysis of the hydrodynamics produced by a violent expiratory event*

Jana Wedel<sup>1</sup>, Jure Ravnik<sup>2</sup>, Matjaž Hriberšek,<sup>2</sup> Mitja Štrakl,<sup>2</sup> Paul Steinmann,<sup>13</sup>

## *Numerična analiza hidrodinamskih razmer med sunkovitim izdihom*

**Abstract.** An important transmission pathway of the disease is aerosols generated by expiratory events such as coughing, sneezing, talking, or breathing. The expelled saliva disperses into particles of different sizes, which are commonly assumed to be spherical. While gravity dominates the dynamics of large droplets, hydrodynamic drag transports the smaller aerosols, which remain suspended for a long time and can thus travel long distances. To analyze the influence of particle dimension and evaporation as well as the impact of different turbulence models on the motion of aerosol-laden clouds, an incompressible RANS simulation of a coughing event was coupled with Lagrangian particle tracking in OpenFOAM.

**Povzetek.** Med kašljanjem, kihanjem, govorjenjem in dihanjem v okolico vnesemo veliko količino slin razpršene v kapljice različnih velikosti. Zaradi majhne velikosti in vpliva površinske napetosti takšne kapljice navadno obravnavamo kot sferične. Večje se v veliki meri hitro posedejo, manjše pa gibanje okoliškega zraka v zraku obdrži daljši čas. Te kapljice izhlapevajo in hkrati nanje odločujoče vplivajo turbulentne strukture v toku. Izdelali smo RANS simulacijo izdiha pri kašljanju in v takšnem tokovnem polju z Lagrangeovim postopkom sledili kapljicam slin, ki v takem primeru nastajajo. Uporabili smo OpenFOAM in analizirali vpliv različnih modelov turbulence in različnih velikosti kapljic.

### 1 Uvod - Introduction

Since its outbreak in 2020, COVID-19 has been responsible for more than 6.3 million deaths worldwide, and it remains a major challenge today, [21]. Severe Acute Respiratory Syndrome CoronaVirus (SARS-CoV-2), the COVID-19 agent, is known to be transmitted by fomite, droplet

---

<sup>1</sup> Universität Erlangen-Nürnberg, Institute of Applied Mechanics

<sup>2</sup> University of Maribor, Faculty of Mechanical Engineering

<sup>3</sup> University of Glasgow, Glasgow Computational Engineering Center

and airborne route. Violent expiratory events such as coughing or sneezing result in an exhaled multiphase turbulent flow of particles suspended in buoyant hot, humid air, [2]. The turbulent flow breaks up the saliva, resulting in the formation of droplets and aerosols of various sizes, [7]. It is a fact that particle diameter and flow characteristics critically affect the range of the infectious particles, [6, 7]. The dynamics of particles with diameter  $d_p > 100 \mu\text{m}$  are dominated by gravity and are characterized by ballistic trajectories that limit their dispersion range and aloft time, [2]. However, particles of smaller size have a longer residence time in air and can therefore travel longer distances, [7]. These particles are dominated by the hydrodynamic drag exerted by the surrounding fluid, [7]. Note that particle size is not a fixed parameter in the case of droplets and aerosols, as ambient conditions may allow evaporation of the liquid phase of the particles, leading to different transport properties, [22]. As  $d_p$  decreases, the influence of gravity decreases, while the importance of hydrodynamic drag increases, possibly becoming the dominant contributor to particle dynamics, [7]. In general, most aerosols and droplets evaporate rapidly after exhalation, leaving behind a suspended droplet nuclei consisting of non-evaporable residues such as virions, salts, or other solid residues, [20, 14]. These nuclei ( $d_p \approx 1 \mu\text{m}$ ), have an extended ability to persist in air, [20]. Note that even a single virion (half-life  $\approx 1 \text{h}$ ) can potentially cause a new infection, underscoring the importance of the airborne route of transmission in the spread of COVID-19, [14]. Researchers worldwide have conducted external transmission studies to explore the spread of COVID-19 in indoor environments and public transportation, such as urban busses, [23]. The present study focuses on the analysis of the motion and deposition of spherical particles and compares different modeling approaches. To this end, we present the preferred modeling approaches. In this study, an in-house evaporating Lagrangian particle tracking using the Buossinesq assumption developed in OpenFoam is used. The approach is based on the particle tracking used in our previous work to study deposition in realistic human lung replicas, [10, 18, 17]. In this study, we analyze the motion and deposition of particle clouds of different sizes containing realistic cough particles, the effect of evaporation, and the impact of different turbulence models. We obtained good agreement between the in-house solver for tracking evaporating particles, which uses the  $k\text{-}\omega\text{-SST DES}$  turbulence model, and DNS results from the literature. In general, we found a strong influence of the turbulence model used on the resulting thermal cloud as well as the particle trajectory, highlighting the importance of using a more realistic turbulence model than standard RANS models such as  $k\text{-}\omega\text{-SST}$ . The paper is organized as follows: In Sect. 2, the physical and mathematical model of a mild cough is presented along with the computational domain and boundary conditions. Finally, in Sect. 3 and Sect. 3.1 the results are summarized and the main conclusions are presented.

## 2 Physical and mathematical model of a mild cough

In this work, we simulate a violent expiratory event, i.e. a mild cough, as a transient air jet  $T_0 = 307.15 \text{K}$  released into a cylindrical environment. We assume that the environment is initially isothermal and rests at  $T_\infty = 288.15 \text{K}$ , resulting in a maximum temperature difference  $\Delta T = 19 \text{K}$ . Note that the overall simulation setup is consistent with the DNS study of a mild cough by Fabregat et al., [6, 7]. The mild cough is assumed to have an acceleration and deceleration phase in which the air jet increases linearly from  $u_0(t = 0) = 0 \text{m/s}$  to a peak value of  $u_m = u_0(t = 0, 15 \text{s}) = 4.8 \text{m/s}$ , followed by a linear decrease to zero at  $t = 0.4 \text{s}$ .

This characteristic cough velocity profile is consistent with measurements in the literature, [7]. After the end of the mild cough ( $t > 0.4 s$ ), a thermal puff forms, which is tracked up to  $t = 1.7 s$ . Note that the thermal properties of the humid air are assumed to be constant and are evaluated at  $\tilde{T} = (T_0 + T_\infty)/2$ . The thermal properties at  $\tilde{T}$  are: Thermal conductivity  $k_f = 0.026 m^{-1}K^{-1}$ , thermal diffusion coefficient  $\alpha = 2.24 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$ , thermal expansion coefficient  $\beta = 0.00347 K^{-1}$  and kinematic viscosity  $\nu = 16 mm^2 s^{-1}$ . In the context of this application, density changes due to temperature are considered according to the Boussinesq approximation ( $\rho(\tilde{T}) = 1.22 kg m^{-3}$ ), i.e. density variations are considered only in the buoyancy term of the vertical momentum equation, [7]. The Reynolds number, evaluated at peak velocity, gives  $Re = u_m D_{inlet} / \nu = 6000$ . The Richardson number renders  $Ri = g\beta\Delta T D_{inlet} / u_m^2 = 5.61 \times 10^{-4}$  ( $g = -9.8 m s^{-2}$ ). The Peclet number of the setup is  $Pe = u_m D_{inlet} / \alpha = 4200$ . In agreement with Fabregat, [7], it is assumed that the variations of physical properties with water vapor concentration are negligible under the given conditions.

## 2.1 Computational domain and boundary conditions

The computational domain is shown in Fig. 1 and consists of a cylindrical inlet section with diameter  $D_{inlet} = 0.02 m$  connected to the main cylindrical domain with diameter  $D = 1.0 m$  and length  $H = 1.6 m$ . To induce turbulence, the injection tube contains a Gaussian bump with height  $H_d = 0.001 m$  and width  $\sigma = 0.002 m$ . The Gaussian bump is centered at  $z_{GB} = -0.01 m$  in the inlet pipe.

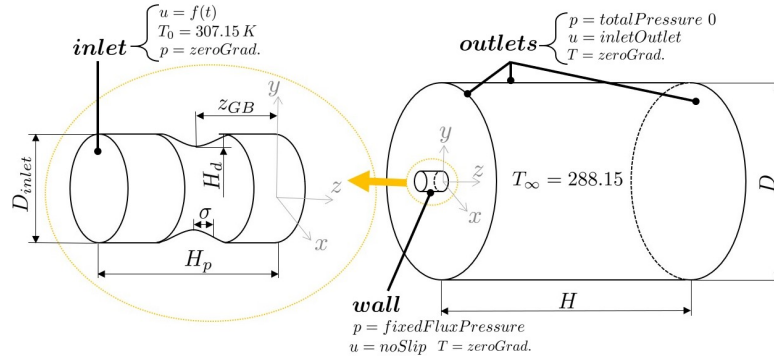


Figure 1: Sketch of the computational domain

## 2.2 Conservation equations

In this article, the flow field is solved in an Eulerian framework. The conservation equations for mass, momentum and energy for incompressible flows are as follows:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \rho \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \beta [T - T_\infty], \quad \frac{\partial T}{\partial t} + [\mathbf{u} \cdot \nabla] T = \alpha \nabla^2 T, \quad (1)$$

where  $t$  denotes time,  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  the velocity field of the fluid,  $p$  the pressure,  $\mu$  the dynamic viscosity of the fluid,  $\rho$  the fluid density,  $\mathbf{g}$  the gravitational acceleration ( $\mathbf{g} = [0 -9.81 m/s^2 0]^T$ ), and  $T$  the temperature field. We use the open source software OpenFOAM, [15, 19] to solve for the flow in the cylindrical environment. The most popular approach for modelling turbulent flows

is the RANS approach because it requires less computational effort, however, at the expense of accuracy, [3]. OpenFOAM uses the finite volume method (FVM) to discretize the above equations. A closed system of equations for the RANS approach (constitutive expression for  $\tau^{\text{RANS}}$ ) is made possible by using an approximate turbulence model. In this work, we employ  $k\text{-}\omega\text{-SST}$  as well as  $k\text{-}\omega\text{-SST DES}$  (hybrid RANS-LES approach), [9]. The latter model is based on the  $k\text{-}\omega\text{-SST}$  turbulence model (eddy viscosity model developed for aeronautical flows with pressure-induced separation and adverse pressure gradient flows) using an additional so-called DES (Detached Eddy Simulation) feature, [11] The idea is to reduce the turbulent viscosity in regions where the mesh is fine enough to resolve large turbulent structures, and hence LES is used here leading to a compromise between LES and URANS, with computational costs in between the two, [11]. Further details on the turbulence models are provided in [9, 11].

### 2.3 Dispersed phase model

In general, the trajectory of a particle is determined by its interaction with the surrounding fluid flow. Since a mild cough consists mostly of particles with  $d_p > 0.3 \mu\text{m}$ , this article uses the Lagrangian framework to describe the motion of the dispersed phase (aerosols, droplets), [3], which are treated as point masses. For sufficiently small aerosols, e.g. in the micro- and submicron range, the surface tension leads to small spherical rigid particles, [1]. The position and velocity of the particles is tracked by evaluating a set of ordinary differential equations (Newton's second law) along the particle trajectory. Maxey and Riley, [13], proposed the equation of motion for small rigid particles. Using the dimensionless parameters  $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}/u_0$ ,  $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}/u_0$ ,  $t^* = tu_0/L_0$  we write for spherical particles: [5]

$$\frac{d\mathbf{v}^*}{dt^*} = \underbrace{\frac{\rho}{\rho_p} \frac{18\nu L_0}{d_p^2 u_0}}_{1/St} \underbrace{\frac{\rho_p}{\rho_p + 0.5\rho}}_A [\mathbf{v}_s^* + \mathbf{I} \cdot [\mathbf{u}^* - \mathbf{v}^*]] + \underbrace{\frac{\rho}{\rho_p + 0.5\rho}}_R \left[ \frac{3}{2} \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \left[ \left[ \mathbf{u}^* + \frac{1}{2} \mathbf{v}^* \right] \cdot \nabla \right] \mathbf{u}^* \right], \quad (2)$$

where  $\mathbf{v}^*$  denotes the non-dimensional particle velocity and  $St$  the Stokes number, comparing the characteristic particle response time  $\tau_p$  with a characteristic time of the flow  $\tau_f$ . In Eq. (2), the prefactors  $A$  and  $R$  describe the density ratios between fluid and particle. Thus, when  $\rho_p \gg \rho$  and  $St \ll 1$ , we identify drag, gravity and buoyancy as the dominant forces and assume other terms such as Brownian motion, added mass, and the Basset history force are negligible, [8]. In addition, Fabregat et al., [7], have shown that the thermophoretic force (which arises due to temperature gradients across the particle characteristic length, i.e  $d_p$ ) can be neglected for this application. Note that for submicron droplets  $d_p < 1 \mu\text{m}$  in air, the rarefaction impact becomes evident and a slip velocity occurs at the particle surface, so that a slip correction must be taken into account, [12], which depends mainly on the Knudsen number  $Kn = \lambda/d_p$ , [12]. Here  $\lambda$  denotes the mean free path length of the molecules and the characteristic particle length is set to  $d_p$ . This slip velocity occurs when  $d_p$  is of the order of  $\lambda$ , [12]. In agreement with Fabregat et al., [7], we use the following slip correction factor  $C_c$ :

$$C_c = 1 + 2Kn [1.205 \exp(-0.0026/2Kn) + 0.425 \exp(-0.74/2Kn)] . \quad (3)$$

with the free mean path  $\lambda = 6.9 \times 10^{-8}$  for air at  $\tilde{T}$ . To account for the interaction of the particles with turbulent eddies in the RANS framework, we use the OpenFOAM model *StochasticDis-*

*persionRAS* to approximate the fluctuation velocity  $\mathbf{u}'$ . The above equations are implemented in a customized version of the OpenFOAM's solver *icoUncoupledKinematicParcelFoam* (OF V7) coupled with the flow solver *buoyantBoussinesqPimpleFoam* (OF V6). During the cough, particles are released every 2 ms, such that 200 particle batches are released at equal time intervals. To investigate the influence of particle size, we examine seven different initial diameters, i.e.  $d_{p,0} = 4, 8, 16, \dots, 256 \mu m$ , reflecting typical particle sizes for coughs. Note that each simulation considers both evaporating and non-evaporating particles. Seeding positions are distributed over a spherical plane at  $z = 0$ . In total, approximately  $2 \times 10^5$  particles are tracked to the end of exhalation.

## 2.4 Evaporation Model

Assuming that the Sherwood and Nusselt numbers are constant ( $Sh = Nu = 2$ ) (considering the small particle Reynolds numbers involved), the dimensional equation for the rate of change of particle diameter due to evaporation of the aqueous fraction can be formulated as follows:

$$dd_p/dt = [4D_{ab}/d_p][\rho_s - \rho_f]/\rho_p. \quad (4)$$

where  $\rho_s$  denotes the saturation water vapor concentration at the particle surface,  $\rho_f$  the local ambient water vapor concentration and  $D_{ab}$  the water vapor diffusivity in air. The evolution of the particle temperature, derived from the thermal energy balance of the particle renders, [7]:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{12\nu_a}{Pr_p} \frac{1}{d_p^2} \left[ \frac{k_v}{k_p} [T_f - T_p] + \frac{D_v \Delta H_v}{k_p} [\rho_f - \rho_s] \right], \quad (5)$$

where  $T_p$  and  $T_f$  are the particle and ambient fluid temperatures,  $k_v = 0.026 W m^{-1} K^{-1}$  and  $k_p = 0.606 W m^{-1} K^{-1}$  are the water vapor and liquid water thermal conductivities,  $\Delta H_v = 2.257 \times 10^6 J kg^{-1}$  is the water enthalpy of vaporization and  $Pr_p = 7.0$  is the dispersed phase Prandtl number according to Fabregat et al., [7]. The saturation water vapor concentration  $\rho_s$  is obtained, using the ideal gas law, [7]:

$$\rho_s = p_s(T_p)/[RT_p], \quad (6)$$

where the water vapor pressure  $p_s(T[K])$  [Pa] is determined using the following correlation:

$$p_s = e^{\left[ \frac{-5.8002206 \times 10^3}{T} + 1.3914993 - 4.8640239 \times 10^{-2} T + 4.1764768 \times 10^{-5} T^2 - 1.4452093 \times 10^{-8} T^3 + 6.5459673 \log T \right]}. \quad (7)$$

The local ambient water vapor concentration  $\rho_f$  is obtained using the relative humidity  $\xi$ :

$$\rho_f = \frac{p_s(T_f)}{RT_f} \frac{p_0}{p_s} \left[ \frac{x_v}{0.62198 + 0.37802 x_v} \right] = \frac{p_s(T_f)}{RT_f} \xi / 100, \quad (8)$$

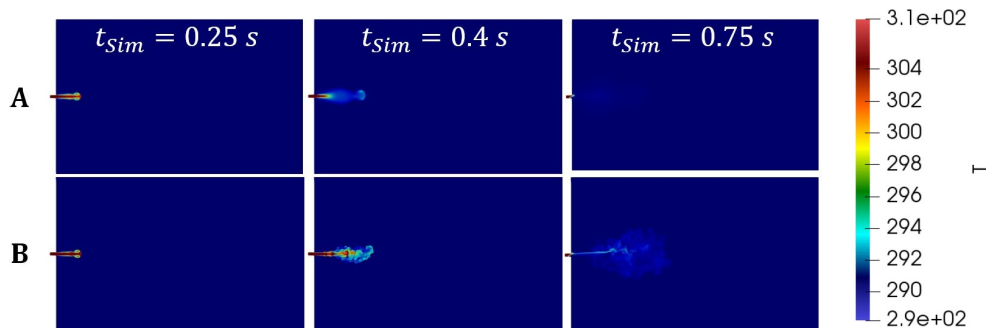
where  $p_0 = 101325 Pa$  denotes the total pressure and  $x_v$  the mass fraction of water in the air. Since both the heat and water vapor transport equations differ only by their  $Pe$  and a similarity of the Schmidt and Prandtl number is given ( $Sc = 0.6, Pr = 0.7$ ), differences in transport between the two scalars due to diffusion effects are neglected and the  $T$  field is used to approximate the water content in the air, [7]. Subsequently,  $x_v$  is determined by assuming a linear relationship between  $T$  and  $x_v = 0.007 + 0.0203[T - T_\infty]/\Delta T$ . Note that the particle evaporation is limited by a minimum particle diameter chosen as  $d_{p,min} = 1/3 d_{p,0}$ , [7].

## 2.5 Applicability of Solver

In agreement with Fabregat et al., [7], given the relatively initial particle volume fraction ( $O(10^{-5})$ ) in realistic expiratory events such as coughing or sneezing, we assume that the effect of particles on the flow is negligible, justifying a one-way coupling between particles and fluid. Crowe confirms this finding by stating that the change in turbulence intensity correlates with particle loading and the ratio of particle diameter to turbulence length scale, [4]. Indeed, the author presents results showing that the change in turbulence intensity due to suspended particles is a function of the ratio of particle size  $d_p$  to the Kolmogorov length scale  $\eta_K$ . The change becomes substantial at  $d_p/\eta_K > 0.1$ . The relation of  $d_p$  to  $\eta_K$  is also studied in our previous work [16], where we confirm that the limit  $d_p/\eta_K < 0.1$  is appropriate. Following Fabregat et al., [7], we assume,  $\eta_K \approx 2 \times 10^{-4} m$  and thus only the largest particles considered ( $d_p = 256 \mu m$ ), which are dominated by gravity, exceed this criteria.

## 3 Results

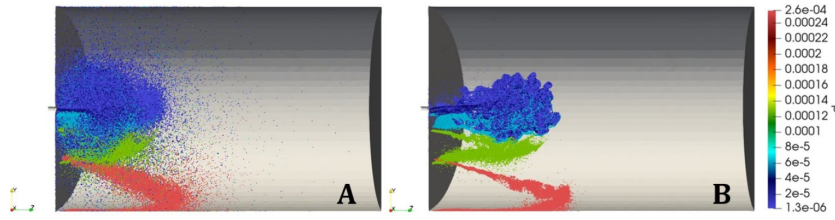
First, we compare the velocity field and propagation of the thermal cloud with the DNS results of a mild cough presented by Fabregat et al., [6]. Here we achieved a visual good agreement of the thermal and velocity field between our k- $\omega$ -SST DES simulation (see Fig. 2 ) and the reference results presented in [6]. In addition, we compare the thermal cloud propagation using the k- $\omega$ -SST DES (B) turbulence model with the standard k- $\omega$ -SST (A) turbulence model, see Fig. 2. As shown, Case B is able to capture the turbulent features of the puff, while Case A fails to predict the transient flow behaviour. Fig. 3 compares the resulting particle cloud at  $t = 0.75 s$



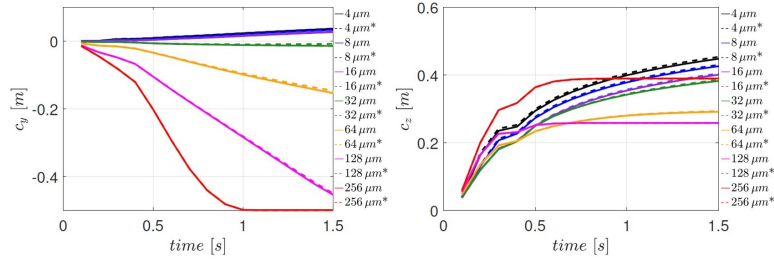
**Figure 2:** Comparison of thermal cloud development for k- $\omega$ -SST (A) and k- $\omega$ -SST DES (B)

for the two turbulence models used. As can be seen, the large particles qualitatively agree, but as the particle size decreases, a larger discrepancy is observed between the two models. When k- $\omega$ -SST DES is used, the small particles migrate with the exhalation puff, while a higher particle dispersion is observed for the k- $\omega$ -SST approach. Fig. 4 displays the trajectories of the centres of particle clouds (using k- $\omega$ -SST DES) consisting of either evaporating (\*) or non-evaporating particles of different initial sizes. The y coordinate of the particle cloud centroid is obtained as follows (z coordinate accordingly):  $c_y = [\sum_{i=1}^n y_i] / n$ , where  $n$  denotes the number of particles in the respective particle cloud. As shown, evaporation has a negligible effect on the overall motion of the cloud. In addition, it is clear that smaller particles stay afloat for a longer and can travel further in the horizontal direction, while larger particles tend to settle.





**Figure 3:** Comparison of particle clouds for k- $\omega$ -SST (A) and k- $\omega$ -SST DES (B) at  $t_{Sim} = 0.75 s$



**Figure 4:** Comparison of particle clouds trajectory for  $d_p = 4, 8, 16 \dots 256 \mu m$  in streamwise ( $z$ ) and gravity-wise direction ( $y$ ). (\*evaporating). Turbulence model: k- $\omega$ -SST DES.

### 3.1 Conclusion

We presented our novel in-house transient evaporating particle tracking solver implemented in OpenFOAM. The novel solver achieved good agreement with DNS results found in the literature. Furthermore, we showed that the evaporation model has a negligible effect on the overall particle motion. However, we identified that the turbulence model has a crucial impact on the particle cloud, especially for smaller particles, i.e.,  $d_p \leq 10 \mu m$ . In this context, the standard k- $\omega$ -SST model yielded strongly different particle cloud distributions than the hybrid RANS-LES k- $\omega$ -SST DES model. Overall, the k- $\omega$ -SST DES turbulence model, despite its higher computational cost ( $\approx 10 - 20 \%$ ), provided a significantly improved representation of the turbulent flow and thus a more realistic particle cloud motion.

### Literature

- [1] S. Balachandar, S. Zaleski, A. Soldati, G. Ahmadi, and L. Bourouiba. Host-to-host airborne transmission as a multiphase flow problem for science-based social distance guidelines. *International Journal of Multiphase Flow*, 132:103439, 2020.
- [2] L. Bourouiba, E. Dehandschoewercker, and J. W. M. Bush. Violent expiratory events: On coughing and sneezing. *Journal of Fluid Mechanics*, 745:537–563, 2014.
- [3] V. K. H. Bui, J.-Y. Moon, M. Chae, P. Duck-Shin, and L. Young-Chul. Prediction of aerosol deposition in the human respiratory tract via computational models: A review with recent updates. page 137, 02 2020.
- [4] Crowe, C.T. On models for turbulence modulation in fluid-particle flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(5):719 – 727, 2000.
- [5] Y. Cui, J. Ravnik, M. Hriberšek, and P. Steinmann. On constitutive models for the momentum transfer to particles in fluid-dominated two-phase flows. *Adv. Struct. Mater.*, 80:1–25, 2018.

- [6] A. Fabregat, F. Gisbert, A. Vernet, S. Dutta, K. Mittal, and J. Pallares. Direct numerical simulation of the turbulent flow generated during a violent expiratory event. *Physics of Fluids*, 33:035122, 03 2021.
- [7] A. Fabregat, F. Gisbert, A. Vernet, J. Ferre, K. Mittal, S. Dutta, and J. Pallares. Direct numerical simulation of turbulent dispersion of evaporative aerosol clouds produced by an intense expiratory event. *Physics of Fluids*, 33:033329, 03 2021.
- [8] F. Greifzu, C. Kratzsch, T. Forgber, F. Lindner, and R. Schwarze. Assessment of particle-tracking models for dispersed particle-laden flows implemented in OpenFOAM and ANSYS FLUENT. *Eng. Appl. Comput. Fluid Mech.*, 10(1):30 – 43, 2016.
- [9] J. H. Ferziger, M. Perić. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer, Berlin Heidelberg, 2008.
- [10] J. Wedel, M. Štrakl, P. Steinmann, M. Hriberšek, J. Ravnik. Can CFD establish a connection to a milder COVID-19 disease in younger people? *Comput. Mech.*, 67:1497–1513, 2021.
- [11] D. Lindblad. Implementation and run-time mesh refinement for the  $k\text{-}\omega$ -SST DES turbulence model when applied to airfoils. *Chalmers University of Technology*, 2014.
- [12] M. Knudsen, S. Weber. Luftwiderstand gegen die langsame bewegung kleiner kugeln. *Annalen der Physik*, 341(15):981–994, 1911.
- [13] M. R. Maxey and J. J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *The Physics of Fluids*, 26(4):883–889, 1983.
- [14] Nicas, M., Nazaroff, W. W., and Hubbard, A. Toward understanding the risk of secondary airborne infection: Emission of respirable pathogens. *J. Occup. Environ. Hyg.*, 2:143–154, 2005.
- [15] OpenFOAM The OpenFOAM Foundation. OpenFOAM Foundation repository for OpenFOAM version 7, 2 2020. Accessed 18 Nov 2020.
- [16] Ravnik, J., Marchioli, C., Soldati, A. . Application limits of jeffery’s theory for elongated particle torques in turbulence: a dns assessment. *Acta Mechanica*, 229(2):827 – 839, 2018.
- [17] J. Wedel, P. Steinmann, M. Štrakl, M. Hriberšek, Y. Cui, and J. Ravnik. Anatomy matters: The role of the subject-specific respiratory tract on aerosol deposition—A CFD study. *Comput Methods Appl Mech Eng.*, 28:115372, 2022.
- [18] J. Wedel, P. Steinmann, M. Štrakl, M. Hriberšek, and J. Ravnik. Risk Assessment of Infection by Airborne Droplets and Aerosols at Different Levels of Cardiovascular Activity. *Arch. Comput. Methods Eng.*, 28(6):4297–4316, 2021.
- [19] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques. *Comput. phys.*, 12:620–631, 11 1998.
- [20] W. F. Wells. On air-borne infection. study ii. droplets and droplet nuclei. *Am. J. Epidemiol.*, 20:611–618, 1934.
- [21] World Health Organization (WHO) 2020. Who coronavirus (covid-19) dashboard, 2022. Accessed 1 Juli 2022.
- [22] X. Xie, Y. Li, A. Chwang, P. Ho, and W. H. Seto. How far droplets can move in indoor environments-revisiting the wells evaporation-falling curve. *Indoor air*, 17:211–25, 07 2007.
- [23] Z. Zhang, T. Han, K. Yoo, J. Capecehatro, A. Boehman, and K. Maki. Disease transmission through expiratory aerosols on an urban bus. *Physics of Fluids*, 33:015116, 01 2021.



## *Strain measurement in high strain rate experiments with edge detection algorithms*

*Yunus Emre Yilmaz<sup>1</sup> in Zoran Ren<sup>1</sup>*

### *Merjenje deformacij v visokohitrostnih eksperimentih z algoritmi za odkrivanje robov*

**Abstract.** Accurate strain measurement is essential for correctly characterising materials in direct impact tests. Specimen strains can be measured with high precision using high-speed cameras and advanced image processing techniques. This paper presents two different edge detection algorithms for strain detection in direct impact tests. The algorithm's accuracy was first verified using the deformation emulator and then used to analyse the real Direct Impact Hopkinson Bar (DIHB) tests of cellular structure. Both algorithms provided similar and consistent results. However, the illumination of the sample-bar interface must be uniform and even for these algorithms to work correctly.

**Povzetek.** Natančno merjenje deformacij je bistveno za pravilno karakterizacijo materialov pri neposrednih udarnih preskusih. Deformacije vzorcev je mogoče izmeriti z visoko natančnostjo z uporabo hitrih kamer v povezavi z naprednimi tehnikami obdelave slik. V tem prispevku sta predstavljena dva različna algoritma za zaznavanje robov za odkrivanje deformacij pri neposrednih udarnih preskusih. Natančnost razvitih algoritmov je bila najprej preverjena z uporabo emulatorja deformacije. Nato sta bila algoritma uporabljena za analizo Direct Impact Hopkinson Bar (DIHB) eksperimentalnih testov celične strukture. Oba algoritma sta zagotovila podobne in dosledne rezultate. Za ustrezno delovanje algoritmov je potrebno zagotoviti dobro in enakomerno osvetlitev območja stika vzorca in palic DIHB preizkuševališča.

## **1 Introduction**

Strain gauges (SGs) are commonly used for measuring strains in high strain rate pressure-bar experiments [3]. Accurate strain measurement of non-uniformly deforming cellular materials with strain gauges is difficult. The alternative to determining the specimen's strain in pressure bar experiments is using high-speed cameras combined with advanced image processing techniques [4].

The digital image correlation (DIC) technique can detect the striker's motion and the sample's deformation [1, 2]. Liu and his team used the Canny Edge detector algorithm in the direct impact test of closed-cell metal foams to detect the deformation of the specimens [5].

Two different edge detection algorithms were developed to determine the deformation and strain values of the specimen in the real Direct Impact Hopkinson Bar (DIHB) experimental

---

<sup>1</sup> University of Maribor, Faculty of Mechanical Engineering

tests, observed with a high-speed digital camera. A deformation emulator was also developed to verify the accuracy of the edge detection algorithms. The emulator generates images based on a specific deformation and a specific number of images.

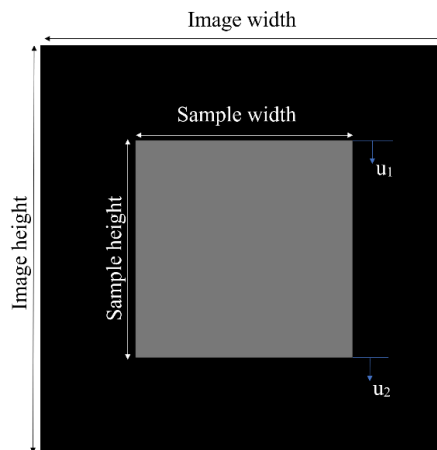
## 2 Materials and Methods

The first edge detection algorithm uses the thresholding technique to distinguish the striker and the transmission bar from the sample and the background by controlling their pixel intensity. The second one uses the well-known Canny edge detection algorithm to detect edges. An experimental deformation emulator has been developed to test the algorithms' accuracy. The emulator generates a series of pre-set images to simulate the deformation of the sample. Both edge detection algorithms were first verified by the emulator and then used to determine the deformation and strain values of the specimens in the real Direct Impact Hopkinson Bar (DIHB) high strain-rate experimental tests.

The edge detection algorithms and the deformation emulator were created with the program "Python". For computer vision and image manipulation purposes, "OpenCV" and "PIL", for array manipulation "Numpy", and for visualisation of the data "Matplotlib" libraries were used.

### 2.1 Deformation Emulator

The deformation emulator generates a series of images to simulate the deformation of the sample from the prescribed top edge displacement for each image, the number of images and the pixel-to-mm ratio of the sample. The user can set the image width, image height, sample width and sample height. Figure 1 shows the constructed image.



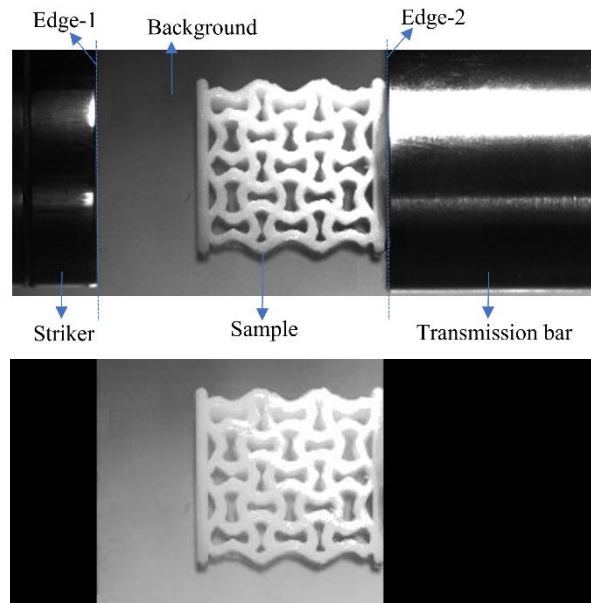
**Figure 1:** Constructed image with deformation emulator

The emulator generates for each image a displacement value for the movement of the top edge of the specimen. Usually, the deformation rate in pressure bar experiments is maximum at the beginning and decreases as the test progresses. This emulator is designed to generate displacement values in accordance with this phenomenon by using a set of polynomial functions.

## 2.2 Pixel intensity threshold base edge detection method

In high strain rate experiments, the captured images usually include the specimen, striker bar, and the background as shown in Figure 2. The pixel intensity range of the striker and transmission bar usually differs from the pixel intensity range of the specimen and background. In that case, the pixel intensities of the striker and transmission bar can be successfully converted to a specific value by setting a pixel intensity threshold. The histogram equalisation method increases the image's contrast and makes it easier to distinguish the pixel intensity of the striker and transmission bar from the background and sample.

The digital camera is carefully positioned so that the straight edges of the striker and transmission bar are aligned with the digital image vertical direction. The striker and the transmission bars are supported with linear bearings and they can only move in horizontal direction. With such alignment it is enough for the algorithm to check a single pixel vertical line in the image consequently. If the colour intensity of a pixel is below the threshold, the colour of the entire vertical line is converted to black colour. That way, the striker and transmission bar edges can be easily identified by the black pixel area border.



**Figure 2:** Edge detection algorithm with thresholding

One of the major challenges in these experiments is that the illumination and reflections change along with the deformation. At the beginning of the experiment the illumination is focused on the sample. However, the pixel intensities of moving parts change as the striker moves toward the sample. Especially the striker regions close to the sample can become too bright to be distinguished with the pixel intensity threshold. This can cause the algorithm to detect backward movement of the striker between some successive frames. Since the striker can move only forward in this type of experiment, such backward movement as possibly estimated by the algorithm can be easily detected and identified as false. In that case the striker edge is estimated to move forward by the same amount as in the previous frame.

### 2.3 Canny Edge detector

The Canny edge detector is a multi-stage algorithm that extracts edge information from images. Since this algorithm first determines the intensity gradients of an image and finds the local maximum, unwanted edges can be detected in some cases. The double thresholding technique is used to determine a more accurate representation of the true edges in the image. This study determines the lower and upper thresholds for the gradient empirically.

Working in a small window instead of processing the entire image makes it easier to interpret the results. The window's position should be changed based on the last determined edge position. After the window is created, the position of the edge can be determined using the top-to-bottom or left-to-right search algorithms, depending on the direction of the deformation. Although both search algorithms are used in this study, only the top-down search algorithm is explained in Table 1. The left-down search algorithm can be understood intuitively.

**Table 1:** Pseudocode for finding top edge coordinate of the sample for top-down search.

Step	Algorithm
1	From top-down, count the white pixels in each row in the window
2	Find the location of the row with the maximum amount of white pixel
3	Sum this value with the vertical coordinate of the top edge of the window to find the edge location

### 2.4 Materials

#### 2.4.1 Deformation emulator experiments

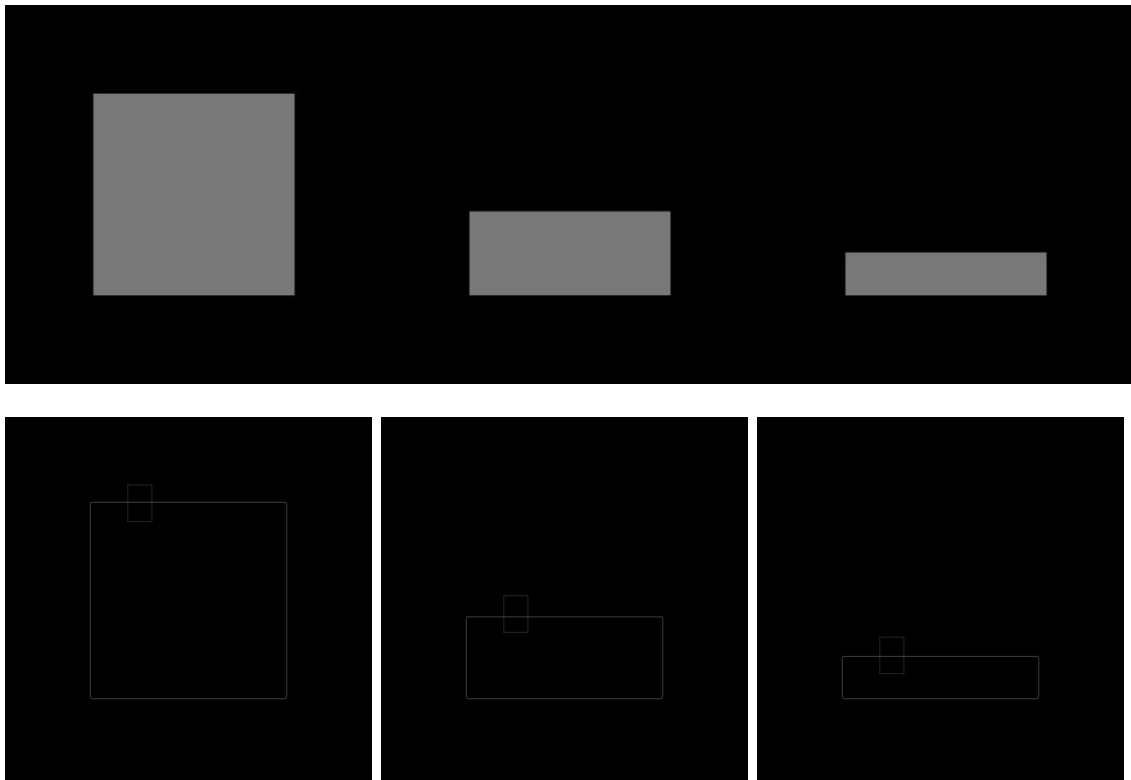
In Table 2 parameters used to construct deformation images are tabulated.

**Table 2:** Emulator experimental data

Image width [pixel]	1500	Frame number	20
Image height [pixel]	1500	Total strain	0.8
Sample width [pixel]	800	Sample width [mm]	20
Sample height [pixel]	800	Sample height [mm]	20

The threshold in the colour intensity threshold base edge detector algorithm was set to 10, and to 50 and 75 for the lower and upper threshold, respectively, in the Canny Edge Detector algorithm.

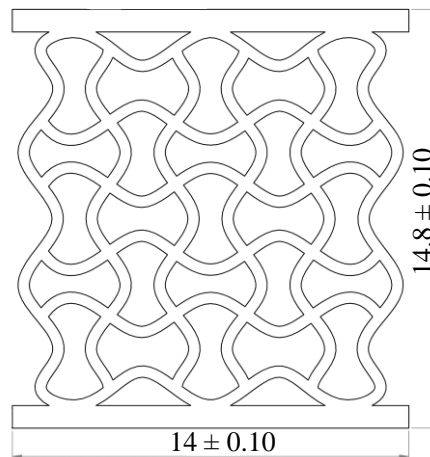
In Figure 3, the images show how the pixel intensity thresholding basis (top) and Canny edge detection (bottom) methods work to detect the top edges along with the experiment. In the first method, the algorithm starts from the top row of the image and looks for the line where black pixels change. In the second algorithm, the row with the whitest pixels in the window represents the position of the edge. It should also be noted that window location is updated based on location of the last found edge.



**Figure 3:** Colour intensity threshold base (upper) and Canny edge detection (lower) methods

#### 2.4.2 DIHB Experiments

The real Direct Impact Hopkinson Bar (DIHB) high strain-rate experimental tests investigated the tetra-chiral cellular structure. Dimensions of the structure are shown in Figure 4. It should be noted that this structure is made out of TPU and has 14 mm depth.

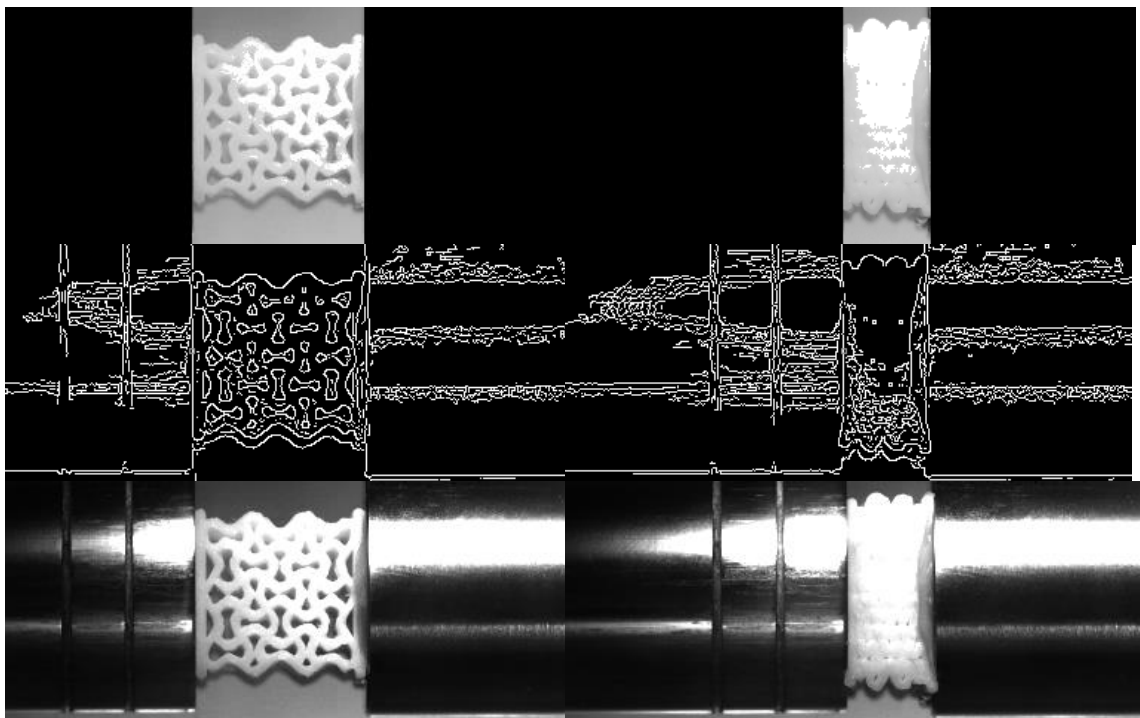


**Figure 4:** Tetra-chiral cellular structure

Deformation of the specimen was recorded with a high-speed digital camera Photron FASTCAM SA-Z at frame rate 210.000 frame/s and the image resolution 384 x 160 pixels (px).

The threshold in the pixel intensity threshold base edge detector algorithm was set to 65, and to 55 and 102 for the lower and upper threshold, respectively, in the Canny Edge Detector algorithm.

In Figure 5, images show how the pixel intensity threshold base (top) and Canny edge detection (middle) methods work to detect the edges along with the DIPB experiment. At the bottom of the figure are also frames from the real experiment.



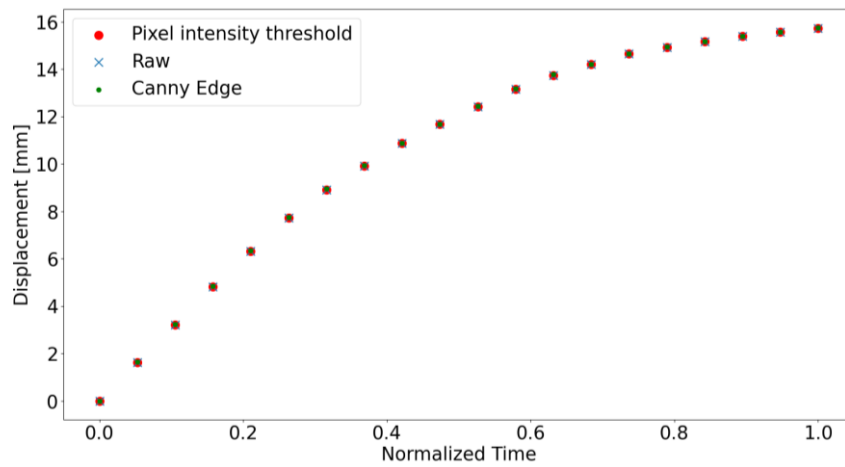
**Figure 5:** Colour intensity threshold base (top) and Canny edge detection (middle) methods and DIHB experiment (bottom)

### **3 Results and Discussion**

#### **3.1 Deformation Emulator Experiment**

Both threshold and Canny edge detector algorithms determined the location of the sample upper edge movement without any error. Figure 6 indicates the actual displacement and measurement of the generated sample upper edge.

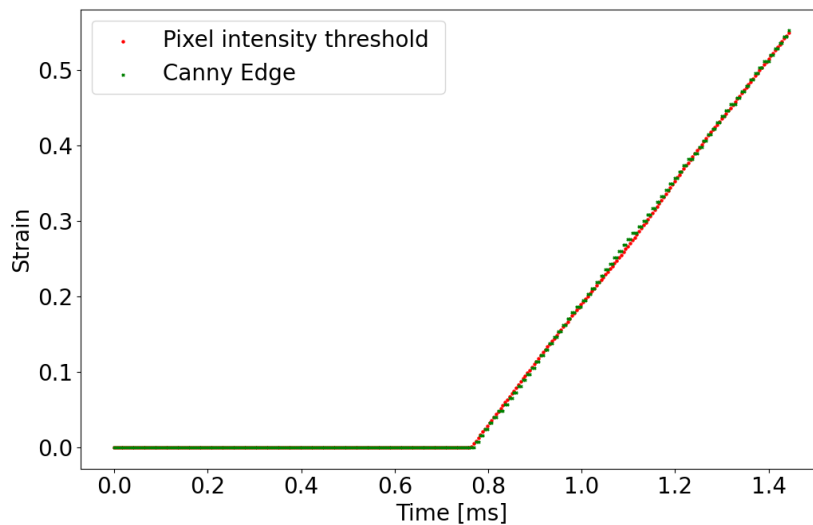




**Figure 6:** Actual and measured displacements of the generated sample upper edge

### 3.2 DIHB Experiment

The sample strain detected by two different edge detection algorithms is shown in Figure 7. As recording started before the striker touched the specimen, there was no strain in the specimen initially. After the first contact, both algorithms measured similar responses.



**Figure 7:** Strain of the sample detected with two different edge detection algorithms

The illumination changes the intensity of the pixels as the specimen deforms and the striker and transmission bar move during the experiment. This may adversely affect the results obtained from both edge detection algorithms. In the case of pixel intensity threshold based edge detection algorithm, the pixel intensity of the striker near the sample needs to be enhanced above the threshold for some images. In such cases edge location could be predicted from the edge location of the previous image under the assumption that its movement is same as the movement of the previous frame. While this assumption is reasonable for this sample which has a constant deformation rate response, it may cause

erroneous results when measuring the behaviour of high-strength materials with typically decreasing deformation rate in DIHB testing.

In the Canny Edge detector algorithm, uneven illumination results in the detection of edges between shadow and bright regions. As the algorithm looks for the vertical line with the maximum number of white pixels inside of the window, selecting the correct window is vital for accurate results. Since the window's location depends on the edge location obtained in the previous image, the wrong edge location causes the next edge to be searched in the wrong window location and results in incorrect local results.

An average deformation of 0.48 pixels was recorded between each successive frame from the contact of the striker with the sample to the end of the experiment. In both approaches to edge detection, sub-pixel deformation values cannot be detected between successive images. However, it is possible to improve the deformation data obtained from both approaches with sub-pixel accuracy by taking into account the trend of the deformation data, e.g., by applying curve fitting or filters such as Savitzky-Golay that do not distort the trend of the data and smooth the data.

#### **4 Conclusion**

Two different edge detection algorithms are developed to detect the deformations in the specimen during experiments with pressure bars with a high strain rate. The algorithms were used to analyse the images acquired during the DIHB test. Both algorithms provided similar and realistic results. The illumination of the regions near the specimen-bar interface should be uniform and consistent for the algorithms to work correctly.

#### **Literature**

- [1] Belda, R., Megías, R., Feito, N., Vercher-Martínez, A. and Giner, E. (2020). Some Practical Considerations for Compression Failure Characterization of Open-Cell Polyurethane Foams Using Digital Image Correlation. *Sensors*, 20(15), p.4141. doi:10.3390/s20154141.
- [2] Bergonnier, S., Hild, F. and Roux, S. (2005). Digital image correlation used for mechanical tests on crimped glass wool samples. *The Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, 40(2), pp.185–197. doi:10.1243/030932405x7773.
- [3] Chen, W.W., Song, B. and Springerlink (Online Service (2011). *Split Hopkinson (Kolsky) Bar : Design, Testing and Applications*. New York, Ny: Springer Us.
- [4] Koohbor, B., Kidane, A., Lu, W.-Y. and Sutton, M.A. (2016). Investigation of the dynamic stress–strain response of compressible polymeric foam using a non-parametric analysis. *International Journal of Impact Engineering*, 91, pp.170–182. doi:10.1016/j.ijimpeng.2016.01.007.
- [5] Liu, J., He, S., Zhao, H., Li, G. and Wang, M. (2018). Experimental investigation on the dynamic behaviour of metal foam: From yield to densification. *International Journal of Impact Engineering*, 114, pp.69–77. doi:10.1016/j.ijimpeng.2017.12.016.



## *Študija učinkovitosti delovanja nebulizatorja za dovajanje zdravil v človeška pljuča*

*Tomas Zadravec<sup>1</sup>, Yan Cui<sup>2</sup> in Jure Ravnik<sup>1</sup>*

### *Study of Efficiency of Jet Nebuliser Aerosol delivery into Human Lungs*

**Povzetek.** V prispevku poročamo o Euler-Lagrange simulacijah večfaznega toka v človeških dihalnih organih. Na podlagi CT posnetka 24 letnega moškega smo izdelali virtualni model pljuč, traheje in zgornjega dela dihal. Analizirali smo odlaganje delcev, ki jih izdelata nebulizator, v pljučih. S pomočjo manipulacije oblike ustnika, položaja vstavitve ustnika in porazdelitve delcev v ustniku smo razpoznali možnosti za izboljšavo nebulizatorja z namenom povečevanja učinkovitosti pri prenosu delcev globoko v pljuča.

**Abstract.** In this paper we report on the Euler-Lagrange simulations of multiphase flow in respiratory tract. Based on a CT scan of a 24 year old male we produced a virtual replica of the respiratory tract including the upper lungs. We analysed the deposition of particles produced by a nebuliser. Based on the manipulation of mouthpiece design, shape, insertional angle and particle distribution, we were able to identify the options available for nebuliser design optimization with the aim to ensure better drug transfer to the deep lung.

#### **1 Uvod**

Zdravljenje z inhalacijskimi raztopinami v nebulizatorjih se pogosto uporablja pri resnih boleznih dihal, npr. pri astmi, kronični obstruktivni pljučni bolezni (KOPB) in novem koronavirusu SARS-CoV-2. V nebulizatorju na curek se zdravilo najprej razprši v tekočem mediju. Po uporabi razpršilne sile (bodisi curek plina ali ultrazvočni valovi) se zdravilo vnese v kapljice aerosola (velike med 0,5  $\mu\text{m}$  in 5  $\mu\text{m}$ ), ki jih nato vdihnemo. Nebulizatorji torej generirajo aerosole iz raztopine oz. suspenzije zdravil in tako omogočajo odlaganje v bolnikov spodnji dihalni trakt.

Učinkovitost vnosa aerosolov do mesta kjer učinkujejo je pri uporabi nebulizatorjev običajno pod 20%. Obstajata dva glavna razloga za tako nizko učinkovitost: Prvič, aerosolne kapljice, ki jih ustvari nebulizator, lahko trčijo, se združijo in na poti tvorijo večje kapljice, kar vodi do znatnega zmanjšanja učinkovitosti odmerjanja zdravila.

---

<sup>1</sup> Univerza v Mariboru, Fakulteta za strojništvo

<sup>2</sup> Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Kitajska

Drugič, dvofazno modeliranje toka aerosolnih kapljic, ki vsebujejo delce zdravila, še ni v celoti raziskano, mehanizem odlaganja aerosolnih kapljic pa ostaja nejasen. Proizvodnja zdravil je draga, zato nizka učinkovitost nebulizatorja povečuje zdravstvene stroške.

Glavni mehanizmi odlaganja aerosolnih delcev, ki jih oddajajo nebulizatorji, so vztrajnostno odlaganje, gravitacijsko posedanje in difuzija [1]. Večji delci ( $>3 \mu\text{m}$ ) se zaradi visokega Stokesovega števila prepočasi odzivajo na spremembe v toku in se tako zaradi vztrajnosti odložijo že v zgornjih delih dihal (npr. v ustni votlini in grlu). Gravitacijsko posedanje je odvisno od hitrosti usedanja, ki je povezana z velikostjo in maso delcev. Difuzijsko odlaganje, h kateremu v večji meri prispevajo turbulentne strukture v toku, se pojavi pri delcih, manjših od  $1 \mu\text{m}$ .

Pnevmatski nebulizatorji, ki se najpogosteje uporabljajo, so poceni serijsko proizvedene naprave za enkratno uporabo. Nebulizatorski sistem vključuje ročni komplet razpršilnika, kompresor ali napajalnik, cevke in dodatke. Na splošno sta kompresor in elektronika trpežna in dolgotrajna, medtem ko naglavni komplet in dodatki zahtevajo pogostejšo menjavo.

Nebulizatorji delujejo s stisnjenim zrakom ali kisikom za aerosoliziranje zdravil v raztopini ali suspenziji. Pogosto se uporabljajo, ker so najcenejša vrsta nebulizatorja. Nebulizator dovaja stisnjen plin skozi curek, kar povzroči območje podtlaka. Raztopina, ki jo je treba aerosolizirati, se u vleče v plinski tok in se strga v tekoči film. Ta film je nestabilen in se zaradi sil površinske napetosti razbije na kapljice. Pregrada, ki se nahaja v toku aerosola, vpliva na te kapljice, ki se raztreščijo na manjše delce.

V prispevku se soočamo z izzivom povečanja učinkovitosti nebulizatorjev s prilagoditvijo geometrijskih parametrov ustnika nebulizatorja, kota vstavitve ustnika in načina vbrizgavanja aerosola v ustnik.

## **2 Numerična simulacija**

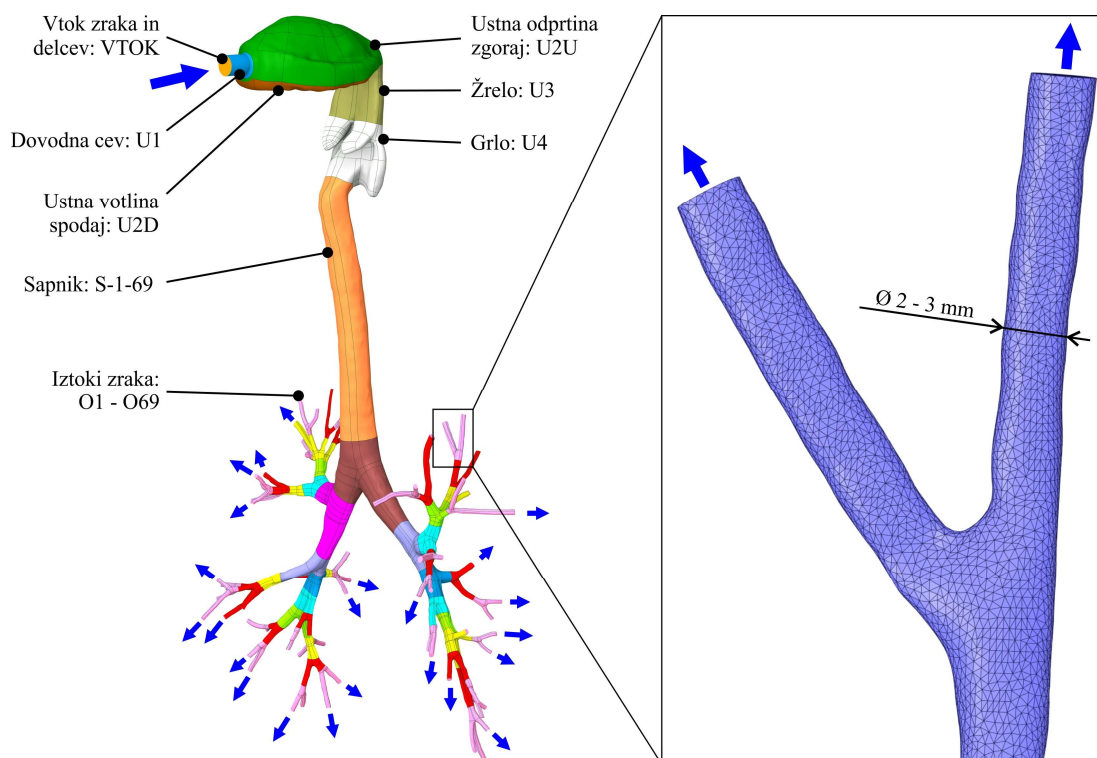
### **2.1 Geometrija človeških pljuč**

V prispevku je obravnavana geometrija pljuč 24-letnega moškega. Slika 1 prikazuje začetno fasetno mrežo v neobdelanem stanju dobljeno z računalniško tomografijo. Obseg domene je: 173,5 mm, 135,5 mm in 356,3 mm v koordinatah  $x$ ,  $y$  in  $z$ . Skupna prostornina domene je  $112,1 \cdot 10^3 \text{ mm}^3$ , skupna površina domene pa  $428,0 \cdot 10^2 \text{ mm}^2$ . Na sliki 1 so prikazana poimenovana površinska področja računske domene. Pljučna krila so bila poimenovana tako, da ena sama poimenovana regija ustreza bifurkaciji sapnika in 64 bifurkacijam sapnic (26 - desno krilo, 38 - levo krilo, 8 generacij).

### **2.2 Numerični modeli dinamike tekočin**

Pri vdihavanju sled lahke ali zmerne aktivnosti je hitrost zraka v začetnem predelu dihalnih poti, torej v nosni votlini, nazofarinksu in sapniku, razmeroma visoka, zato je tok pretežno turbulenten [2]. Za simulacijo toka v statičnem volumnu človeških pljuč so zato uporabljeni Reynoldsove povprečne Navier Stokesove enačbe (RANS) in model turbulence s prenosom strižne napetosti (SST) s privzetimi konstantami [3].

Za vsak obravnavan primer je bila izvedena časovno odvisna tokovna simulacija. Razlog za ta pristop je v prejšnjih izkušnjah s časovno neodvisnimi simulacijami s katerimi ni bilo mogoče doseči ustrezne konvergence, tako s spremenjenimi faktorji pod-relaksacije enačb »URF« kot tudi z ustrežno strategijo reševanja.



**Slika 1:** Površinske regije računske domene (levo), fasetna mreža (desno).

Za reševanje tokovnega in tlačnega polja je bil uporabljen iterativni algoritem »SIMPLE«. Transportne enačbe so bile prostorsko diskretizirane z uporabo numeričnih shem drugega reda, medtem ko je bila za časovno integracijo uporabljena implicitna formulacija prvega reda. Vsi primeri so bili inicializirani z uporabo metode hibridne inicializacije.

Za vsak primer je bilo izračunanih 100 korakov s fiksnim časom 0,001 s. Število iteracij za vsak časovni korak je bilo omejeno na 100. To je bilo zadostno za zagotovitev popolne konvergence, kar pomeni, da so vsi preostanki enačb dosegli vrednosti pod  $1e-6$ .

### 2.3 Numerični model za sledenje delcem

V tem delu je bila interakcija med fluidom (zrak) in diskretno fazo (delci) dosežena z modelom diskretne faze »DPM«. Uporabljen je enosmerno sklopljen model tj. brez upoštevanja vpliva delcev na tokovno polje zraka saj je obravnavan tok razredčena suspenzija [4].

Ansys Fluent napove pot delcev diskretne faze z integracijo enačbe ravnotežja sil na delcu v Lagrangevem zapisu. To ravnotežje sil izenači vztrajnost delcev s silami, ki delujejo na delec, in se lahko zapiše kot:

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = m_p \frac{\vec{u} - \vec{u}_p}{\tau_r} + m_p \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (1)$$

kjer je  $m_p$  masa delca,  $\vec{u}$  je hitrost tekočine,  $\vec{u}_p$  je hitrost delca,  $\rho$  je gostota tekočine,  $\rho_p$  je gostota delca in  $\vec{F}$  je dodatna sila. Prvi člen na desni strani je sila upora.  $\tau_r$  je čas relaksacije kapljic ali delcev, izračunan z:

$$\tau_r = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu C_d Re} \frac{24}{Re} \quad (2)$$

kjer je  $\mu$  molekularna viskoznost tekočine,  $d_p$  je premer delca,  $C_d$  je koeficient upora in  $Re$  je relativno Reynoldsovo število, definirano kot:

$$Re = \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu} \quad (3)$$

Koeficient upora,  $C_d$ , za gladke delce se izračuna z nastavkom:

$$C_d = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (4)$$

Kjer so  $a_1$ ,  $a_2$  in  $a_3$  konstante, ki se uporabljajo v več območjih  $Re$ . V stohastičnem modelu sledenja delcem je disperzija, ki jo povzroči turbulenca v tokovnem polju, predvidena s trenutno vrednostjo nihajoče hitrosti toka fluida:

$$u = \bar{u} + u' \quad (5)$$

Z izračunom poti delca na ta način za zadostno število reprezentativnih delcev (imenovanih "število poskusov") je bil vključen naključni učinek turbulence na disperzijo delcev. Časovni korak za enačb gibanja delcev je izračunan avtomatično, na podlagi faktorja dolžine koraka.

## 2.4 Robni pogoji in predpostavke

Za vse obravnavane primere so bili predpostavljene enaki obratovalni pogoji. Delovni tlak je znašal 101,325 Pa. Omogočena je bila sila gravitacije v smeri z-koordinate z gravitacijskim pospeškom  $-9,81 \text{ m/s}^2$ . Predpisana je bila konstantna gostota fluida  $1,225 \text{ kg/m}^3$  (zrak pri  $15^\circ \text{C}$  in predpisanem tlaku). Tok fluida je bil obarvan kot nestisljiv, saj so hitrosti relativno nizke.

Za vse obravnavane primere so bili predpisani enaki robni pogoji, razen vstopna hitrost zraka, ki je bila variirana v parametrični študiji. Podobno je bila variirana porazdelitev velikosti delcev. Masni pretok delcev za vse primere znašal  $1e-5 \text{ kg/s}$ . Na vseh iztokih je bil predpisan tlak 0 Pa. Predpostavljeno je bilo da se delci ob trku s površino ujamejo. Vse druge nastavitve, ki niso navedene, so ostale kot privzete.

Izvedena je bila študija neodvisnosti rezultatov od mreže. Skupno je bilo ustvarjenih sedem različnih numeričnih mrež z različnimi parametri velikosti, ki so vplivali predvsem na končno število elementov računske domene, ki se je gibala od 1,07 do 16,9 milijonov.

Vhodna hitrost zraka za študijo ustreznosti mreže je bila  $3,2 \text{ m/s}$  za vseh sedem obravnavanih mrež. Spremljali smo povprečne vrednosti hitrosti in turbulentne kinetične energije na štirih ravninah v domeni. Mreža, ki vsebuje 13,5 milijona elementov s 5 inflacijskimi plastmi in minimalno pravokotno kakovostjo 0,4 je bila prepoznana kot ustrezna.

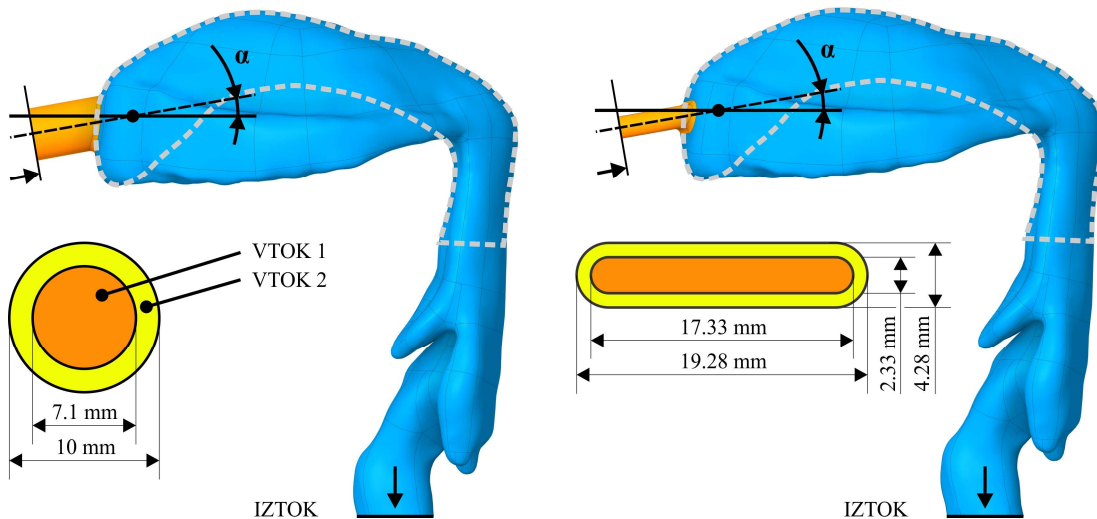
## 2.5 Obravnavani primeri

Najprej smo z uporabo ustrezne mreže izračunali tokovno polje v celotni geometriji pljuč. Za ta primer je bila izbrana vstopna hitrost zraka  $3,2 \text{ m/s}$ . Za to tokovno polje je bilo ovrednoteno odlaganje 100.000 delcev treh velikostnih skupin ( $1 \mu\text{m}$ ,  $5 \mu\text{m}$  in  $10 \mu\text{m}$ ), vbrižganih na vtoku.

Nato je bila izvedena obsežna parametrična študija. Ocenjeni sta bili dve različni izvedbi ustnika: okrogel in podolgovat. Poleg tega so bili obravnavani trije različni nagibi navzgor od vodoravne osi:  $0^\circ$ ,  $10^\circ$  in  $20^\circ$ . To ima za posledico šest različnih geometrijskih konfiguracij dovoda zraka v domeno in s tem šest različnih računskih mrež.

V parametrični študiji so bile upoštevane tri različne vstopne hitrosti zraka: 3,2 m/s, 12,8 m/s in 19,2 m/s, kar ustreza pretokom 15 l/min, 60 l/min in 90 l/min. Hitrost je bila predpisana konstantno po celotnemu prerezu vstopne površine hitrosti.

Nazadnje sta bili upoštevani dve različni lokaciji vbrizgavanja delcev. Najprej je bilo vbrizgavanje nastavljeno na celotno površino vtoka (VTOK1 in VTOK2). Nato je bil za dovajanje delcev uporabljen samo notranji del površine vtoka (VTOK1) za stimulacijo nekakšnega "zaščitnega" toka čistega zraka okoli toka zraka z delci na sredini.



Slika 2: Geometrični parametri in robni pogoji vbrizgavanja delcev parametrične študije.

V parametrični študiji je bil upoštevan le omejen predel domene, in sicer zgornji del pljučnega volumna, tj. ustna votlina, žrelo in grlo ter del sapnika. To je bilo storjeno, da se čim bolj skrajša čas izračuna in obdelave ter zaradi dejstva, da se glavno odlaganje delcev dogaja na zgoraj navedenih območjih [5].

Za razliko od prvih treh primerov, kjer je uporabljena fiksna velikost vseh delcev je v parametrični študiji uporabljena Rosin-Rammlerjeva porazdelitev velikosti delcev (razpon: 1-10  $\mu\text{m}$ , srednji premer: 2,3  $\mu\text{m}$ , parameter razpršitve: 3,5), podobno kot v [6].

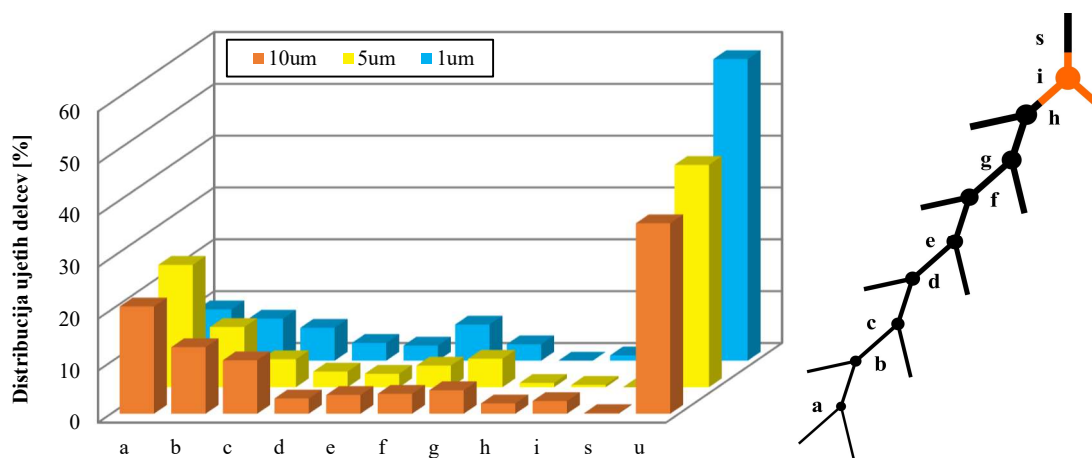
### 3 Rezultati

#### 3.1 Študija odlaganja delcev na površinah

Najprej so predstavljeni rezultati odlaganja delcev za osnovni primer torej za celotno geometrijo pljuč, ki vključuje okrogel ustnik pod kotom  $0^\circ$  glede na vodoravno os. Odstotek ujetih delcev  $\eta_t$  na stenah pljuč je izražen kot:

$$\eta_t = \frac{n_t}{n_p} \quad (6)$$

Kjer je  $n_t$  skupno število ujetih delcev na različnih površinskih regijah in  $n_p$  je število sledenih delcev. Odstotek ujetih delcev narašča s povečanjem velikosti delcev: 0,79 % za 1  $\mu\text{m}$ , 3,84 % za 5  $\mu\text{m}$  in 38,12 % za 10  $\mu\text{m}$  predvsem zaradi vztrajnostnega odlaganja. Porazdelitev odloženih delcev v različnih regijah je prikazana na sliki 3.



**Slika 3:** Porazdelitev ujetih delcev med različnimi površinskimi regijami pljuč.

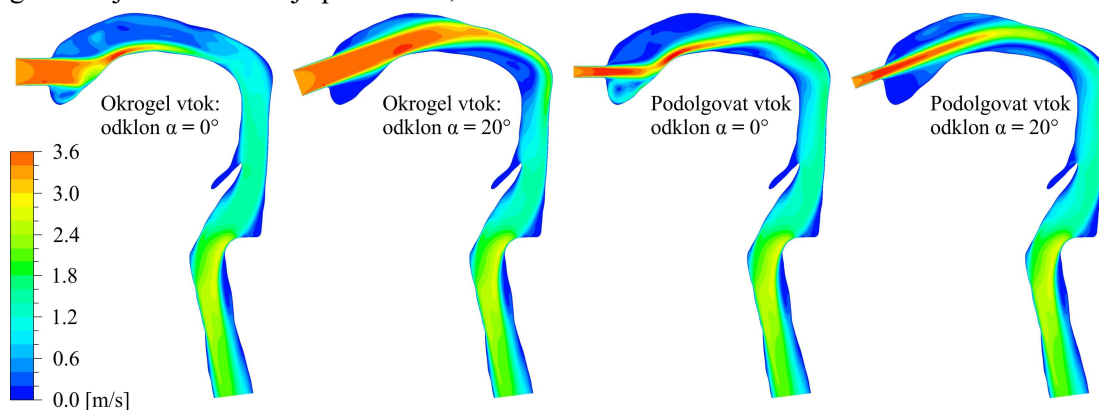
Porazdelitev odlaganje delcev med različnimi bifurkacijami:  $a - i$  korelira s številom bifurkacij, prisotnih v skupini. Iz profila porazdelitve je razvidno, da se ne glede na premer delcev največ delcev odloži v območju  $u$ , ki predstavlja zgornji del dihalnih poti. Zato je tukaj pomembno optimizirati parametre, ki vplivajo na odlaganje delcev.

### 3.2 Parametrična študija učinkovitosti prenosa delcev v pljuča

Hitrost zraka na vtoku ima velik vpliv na učinkovitost prenosa delcev v globlje dele pljuč ne glede na obliko ustnika in lokacijo vbrizgavanja delcev. Odstotek prenesenih delcev v globlje dele pljuč  $\eta_e$  je izražen kot:

$$\eta_e = \frac{n_e}{n_p} \tag{7}$$

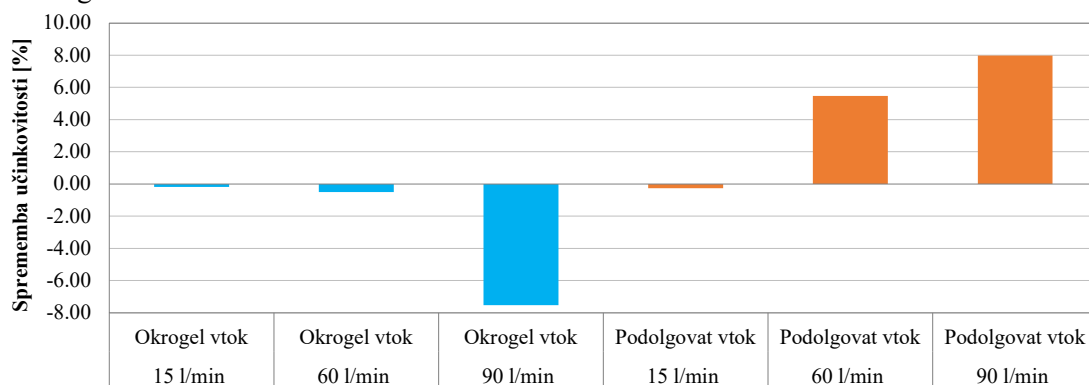
Kjer je  $n_e$  skupno število delcev, ki so bili prenešeni v globlje dele pljuč. Pri pretoku zraka 15 l/min je povprečni odstotek prenesenih delcev v globlje dele pljuč 98,90 %, pri 60 l/min pa odstotek pade na 90,45 % in nazadnje pri 90 l/min odstotek prenesenih delcev za vse geometrijske kombinacije pade na 76,81 %.



**Slika 4:** Hitrostno polje štirih mejnih geometričnih primerov. Vstopna hitrost: 3,2 m/s.



Vpliv kota ustnika za vsako skupino pretoka in geometrije ustnika je bil ovrednoten s primerjavo odstotka prenesenih delcev v globlje dele pljuč med dvema primeroma: 0° in 20°. Kot je razvidno iz slike 5, ima kot ustnika glede na vodoravno os negativen vpliv pri primerih z okroglim dovodnim ustnikom.

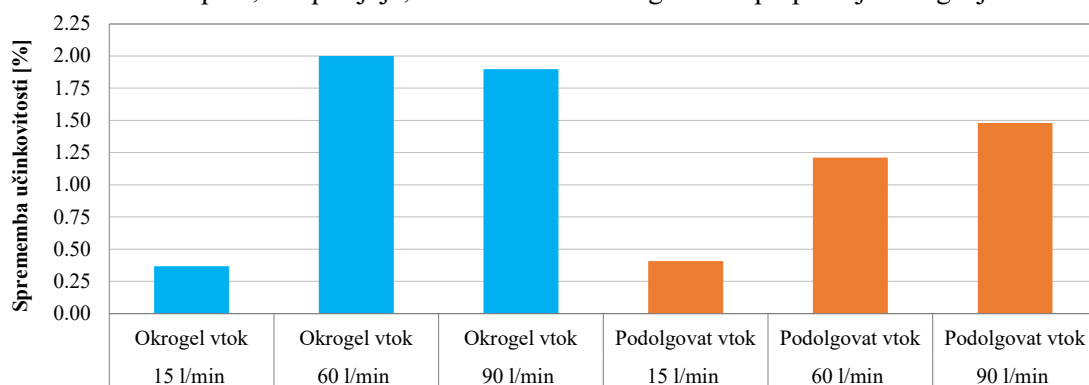


**Slika 5:** Vpliv kota ustnika na odstotek prenesenih delcev v globlje dele pljuč.

Na sliki 4 je mogoče opaziti da naklon ustnika 0° povzroči območje velikih hitrosti blizu spodnjih sten ustnega predela, kjer pride do vztrajnostnega odlaganja. Okrogel ustnik z naklonom 20° premakne to območje visoke hitrosti v globlje območje zgornje stene ustne votline, medtem ko se območju visoke hitrosti v bližini območja jezika ne izognemo povsem, saj je premer ustnika relativno velik v primerjavi z višino ustne votline.

Nasprotno kot pri okroglem ustniku, pa je vpliv kota pozitiven za podolgovat ustnik. Pri primerjavi primerov z naklonom 0° in 20° pri 90 l/min za podolgovati ustnik lahko opazimo skoraj 8-odstotno razliko. Primer s podolgovatim ustnikom in 20° naklonom glede na vodoravno os ustvarja manj intenzivno območje visokih hitrosti tako v bližini zgornjega dela ustne votline kot v predelu jezika.

Vpliv mesta dovajanja delcev za vsako skupino pretoka in geometrije ustnika je bil ovrednoten s primerjavo odstotka prenesenih delcev v globlje dele pljuč med dvema načinoma dovoda: skozi obe površini vtoka (VTOK1 in VTOK2) in samo skozi notranjo površino vtoka (VTOK1). Kot je razvidno iz slike 6, je vpliv mesta vbrizgavanja delcev pozitiven za vse obravnavane skupine, kar potrjuje, da zaščitni tok čistega zraka preprečuje odlaganje delcev.



**Slika 6:** Vpliv mesta dovajanja delcev na odstotek prenesenih delcev v globlje dele pljuč.

#### 4 Zaključki

Simulirali smo tokovno polje in odlaganje delcev v človeških pljučih. Uporabili smo vstopno hitrost 3,2 m/s in obravnavali delcev premera 1  $\mu\text{m}$ , 5  $\mu\text{m}$  in 10  $\mu\text{m}$ . Ugotovili smo, da se delci odlagajo na različnih delih pljuč, predvsem na območju ustna votline, žrela in grla. Ugotovili smo povezavo med številom bifurkacij, ki vodijo do posameznega področja, in količino odloženih delcev na tem območju.

Nadalje smo izvedli parametrično študijo različnih robnih pogojev na vstopu in različnih geometrij ustnika nebulizatorja. Upoštevali smo tri nagibe ustnika 0°, 10° in 20°, tri vstopne hitrosti zraka 3,2 m/s, 12,8 m/s in 19,2 m/s, ki ustrezajo pretokom 15 l/min, 60 l/min in 90 l/min. V parametrični študiji smo se osredotočili zgolj na zgornji del dihal, to je na ustno votlino, žrelo, grlo in del traheje.

Ugotovili smo, da ima pretok zraka odločujoč vpliv na odlaganje delcev, ne glede na obliko ustnika in porazdelitev delcev na vstopu. Nagib ustnika, če je ta okroglega preseka, glede na vodoravnico ima negativen vpliv na odlaganje – zabeležili smo do 8% razlike pri visokih pretokih. Pri vodoravnem položaju ustnika zabeležimo veliko inercialnega odlaganja na območju jezika, pri visokem nagibu ustnika (20°), pa se jeziku izognemo in zabeležimo večje odlaganje na zadnje delu ustne votline. Pri ustniku podolgovatega preseka zabeležimo manjše odlaganje v zgornjem delu dihal, kar pomeni, da več zdravila doseže pljuča. Pri 20° nagibu opazimo znatno manjše odlaganje na zadnji steni ustne votline, kar vodi zmanjšanja celokupnega odlaganja.

Ugotavljamo tudi, da vnos delcev samo na sredini ustnika in ne ob straneh v vseh primerih ugodno vpliva na odlaganje v zgornjem delu dihal. Zaključimo lahko, da ob upoštevanju aerodinamskih karakteristik lahko izboljšamo učinkovitost doziranja zdravil preko nebulizatorja v človeška pljuča.

#### Literatura

- [6] K. Ahoosh, M. Saidi, H. Aminfar, M. Mohammadpourfard, H. Hamishehkar, and S. Yaqoubi, "Dry powder inhaler aerosol deposition in a model of tracheobronchial airways: Validating CFD predictions with in vitro data," *Int. J. Pharm.*, vol. 587, no. June, p. 119599, 2020.
- [5] K. Bass, D. Farkas, A. Hassan, S. Bonasera, M. Hindle, and P. W. Longest, "High-efficiency dry powder aerosol delivery to children: Review and application of new technologies," *J. Aerosol Sci.*, vol. 153, no. September 2020, p. 105692, 2021.
- [2] X. Chen, W. Zhong, B. Sun, B. Jin, and X. Zhou, "Study on gas/solid flow in an obstructed pulmonary airway with transient flow based on CFD-DPM approach," *Powder Technol.*, vol. 217, pp. 252–260, 2012.
- [1] D. Gardenhire, D. Burnet, and T. Myers, "A Guide To Aerosol Delivery Devices," *Am. Assoc. Respir. Care*, vol. 4th Editio, pp. 1–48, 2017.
- [4] M. M. Rahman, M. Zhao, M. S. Islam, K. Dong, and S. C. Saha, "Aging effects on airflow distribution and micron-particle transport and deposition in a human lung using CFD-DPM approach," *Adv. Powder Technol.*, vol. 32(10), pp. 3506-3516, 2021.
- [3] M. Sommerfeld, Y. Cui, and S. Schmalfuß, "Potential and constraints for the application of CFD combined with Lagrangian particle tracking to dry powder inhalers," *Eur. J. Pharm. Sci.*, vol. 128, no. December 2018, pp. 299–324, 2019.



## *Vpliv hitrosti rasti na razvoj deformacijskih vzorcev pri filmih na ravninskih viskoelastičnih substratih*

Jan Zavodnik<sup>1</sup> in Miha Brojan<sup>1</sup>

### *Influence of growth rate on evolution of deformations in films on planar viscoelastic substrates*

**Povzetek.** V tankostenskih strukturah, ki so ali same viskoelastične ali pa so sklopljene z drugimi viskoelastičnimi strukturami, je oblika obremenitvene funkcije zaradi interakcije med viskoelastičnostjo in multistabilnostjo bistvenega pomena, saj ima močan vpliv na končno deformacijsko obliko. Multistabilnost, ki je lahko posledica nelinearne zveze med pomiki in deformacijami ali materialne nelinearnosti, namreč močno poveča število razpoložljivih deformacijskih stanj. Za namen preučevanja takšnih sistemov smo razvili splošen visko-hiperelastični model, ki je zmožen opisati velikih deformacij viskoelastičnih struktur, ki so obremenjene z različnimi zunanji obremenitvami. Pokazano je bilo, da časovna oblika obremenitve, v povezavi z viskoelastičnostjo, močno vpliva ne le na razvoj prehodnega deformacijskega vzorca, ampak tudi na to, v katero od mnogih lokalno stabilnih deformacijskih stanj se bo razvil sistem, ki lahko tako ostane v “zamrznjenem” ravnovesnem stanju, ki je nedosegljivo za čisto elastične strukture.

**Abstract.** In thin-walled structures, which exhibit viscoelastic behaviour or are coupled with other viscoelastic structures, the shape of the time loading function strongly influences the final deformation shape, due to the interaction between viscoelasticity and multistability. Multistability, which is a consequence of a nonlinear relation between the strains and displacements or material nonlinearity, drastically increases the range of available deformation states. For the purpose of analyzing such systems, we developed a general finite deformation visco-hyperelastic model, capable of modeling large deformations of viscoelastic structures, loaded with growth or external loads. We show that the shape of time dependent loading function in conjunction with viscoelasticity strongly influences not only the development of transient deformation pattern, but also to which of many locally stable deformation states the system will evolve. This way the system can lock in a “frozen” equilibrium state, which is unattainable by purely elastic structures.

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

## 1 Uvod

V današnjem času se v inženirski praksi vse več uporabljajo sistemi, kjer se velike deformacije struktur izkorišča za napredne funkcionalnosti, kot so npr. za izdelavo pametnih površin [1], pametnih adhezivnih sistemov [2], mehko robotiko [3] in mehanistični opis morfogeneze [4]. Takšni sistemi so običajno razviti s pomočjo mehkih sintetičnih in naravnih polimerov, katerih območje deformacij sega globoko v nelinearni deformacijski režim in v splošnem izražajo časovno odvisno (viskoelastično) notranjo disipacijo energije, nereverzibilne deformacije, fazno zakasnitev med obremenitvijo in deformacijo in evolucijo deformacij na več časovnih skalah.

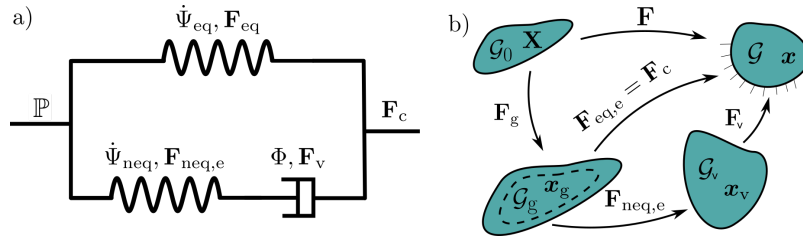
Obnašanje struktur v nelinearnem režimu je dokaj dobro raziskano, vendar je običajno zanemarjeno časovno odvisno obnašanje gradiv. Strukture se običajno modelira z uporabo elastičnih lastnosti takojšnjega odziva na obremenitev (pri  $t \rightarrow 0$ ) ali ravnovesnega odziva na obremenitev (pri  $t \rightarrow \infty$ ). Prav tako je tudi reologija časovno odvisnih (viskoelastičnih gradiv) dobro razvita, vendar le v režimu linearnih deformacij. Nasprotno pa interakcija med viskoelastičnostjo in multistabilnostjo (več lokalno stabilnih ravnovesnih stanj gradiva), ki je posledica velikih deformacij, ni dobro raziskana, čeprav je ravno ta interakcija odloča, v katero končno ravnovesno stanje se bo razvil sistem. Za analizo te interakcije je izredno primeren sistem tankega elastičnega filma na viskoelastičnem substratu, saj izkazuje multistabilno obnašanje, ko se na površini pojavi lokalni uklon (kvazi-periodični deformacijski vzorci), poleg tega pa se zaradi viskoelastične disipacije energije substrata obnaša časovno odvisno in je zato razvoj deformacij odvisen od časovne funkcije obremenjevanja, ne le od velikosti obremenitve. Na podobnih sistemih so bile do sedaj narejene le analize gubanja z lineariziranimi teorijami, ki niso bile sposobne opisovati interakcije kvazi-periodičnih deformacijskih načinov globoko v po-uklonskem območju [5], ali pa so bile narejene le "black-box" numerične simulacije, kjer razvoj ne-intuitivnih, zanimivih in z elastično teorijo nedosegljivih deformacijskih vzorcev ni bil pojasnjen [6].

V tem prispevku je predstavljen splošni 3D visko-hiperelastični model, ki s pomočjo multiplikativne dekompozicije povezuje teorijo velikih deformacij modela viskoelastičnosti SLS (standardne linearne trdnine) in deformacije gradiva zaradi rasti. S pomočjo razvitega modela smo analizirali vpliv interakcije viskoelastičnosti z multistabilnostjo in s tem povezano tekmovanje med deformacijskimi načini med evolucijo končnega deformacijskega vzorca globoko v nadkritičnem območju. Pri tem vzorčni sistem, na katerem je bila teorija preizkušena, sestavlja tanek film debeline  $h_f$  in substrat debeline  $H$ , oba pa imata dolžino  $L$ . Obremenitev predstavlja homogena časovno predpisana rast filma vzdolž njegove osrednje ploskve. Analiziran je vpliv različnih hitrosti obremenjevanja pri enakih obremenitvah na ne le evolucijo, ampak tudi na končni deformacijsko stanje strukture in na nastanek elastično nedosegljivih "zamrznjenih" deformacijskih stanj.

## 2 Matematični model visko-hiperelastičnosti

Zvezno telo, parametrizirano s krajevnim vektorjem  $\mathbf{X}$ , se pod vplivom deformacije, ki je posledica rasti, preslika v novo konfiguracijo, ki jo parametriziramo s krajevnim vektorjem  $\mathbf{x}$ . Pri tem definiramo polje pomikov kot  $\mathbf{u} = \mathbf{x} - \mathbf{X}$ , gradient deformacije pa  $\mathbf{F} = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X} = \nabla \mathbf{x} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}$ . Rast strukture je v matematičnem modelu vpeljana prek multiplikativne dekompozicije defor-

macijskega gradienta  $\mathbf{F}$ , ki je sestavljen iz deformacijskega gradienta rasti  $\mathbf{F}_g$  in deformacijskega gradienta viskoelastičnega dela  $\mathbf{F}_c$ ; iz česar sledi  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_c \mathbf{F}_g$  [7]. Shematično to dekompozicijo prikazuje slika 1b). Viskoelastični del je modeliran s SLS modelom [8, 9], ki je shematično prikazan na sliki 1a). V tem modelu predlagamo, da je konstitutivni del deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}_c$  predstavlja ravnovesni del deformacije  $\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_{eq,e}$ , ali pa je sestavljen iz ne-ravnovesnega (prehodnega) in viskozne deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_v \mathbf{F}_{neq,e}$ , glej sliko 1b). Prek takšnega formalizma lahko zapišemo deformacijski gradient kot  $\mathbf{F} = \mathbf{F}_v \mathbf{F}_{neq,e} \mathbf{F}_g$ .



**Slika 1:** a) SLS materialni model zapisan z elementi kompozicije deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}$  in potenciali  $\Psi$  ter  $\Phi$ . b) Shematična predstavitev dekompozicije deformacijskega gradienta  $\mathbf{F}$ .

Visko-hiperelastični materialni model zapišemo s pomočjo Rayleighovega potenciala  $\mathbb{P}$  [10], ki ga bolj podrobno zapišemo kot vsoto hitrosti spremembe statične ravnovesne potencialne energije na enoto začetne prostornine  $\dot{\Psi}_{eq}$ , statične ne-ravnovesne potencialne energije na enoto začetne prostornine  $\dot{\Psi}_{neq}$  in viskozne disipacije na enoto začetne prostornine. Torej

$$\mathcal{P} = \int_{\Omega} \mathbb{P} d\Omega = \int_{\Omega_0} (\dot{\Psi}_{eq} + \dot{\Psi}_{neq} + \Phi) J_g d\Omega_0, \quad (1)$$

kjer je  $J_g = \det(\mathbf{F}_g)$  determinanta gradienta rasti, ki upošteva spremembo prostornine zaradi rasti [7]. Izberemo neo-Hooke-ov materialni zakon [11], katerega gostota deformacijske energije je podana kot

$$\Psi_{\alpha}^{neo} = \frac{\mu_{\alpha}}{2} (\text{tr}(\mathbf{C}_{\alpha,e}) - 3 - 2 \ln J_{\alpha,e}) + \frac{\Lambda_{\alpha}}{2} (\ln J_{\alpha,e})^2, \quad (2)$$

kjer sta  $\mathbf{C}_{\alpha,e} = \mathbf{F}_{\alpha,e}^T \mathbf{F}_{\alpha,e}$  in  $J_{\alpha,e} = \det(\mathbf{F}_{\alpha,e})$  desni Cauchy-Greenov deformacijski tenzor in determinanta deformacijskega gradienta. Materialna parametra sta prva  $\Lambda_{\alpha}$  in druga  $\mu_{\alpha}$  Laméjeva konstanta; in sicer  $\alpha = eq$  za primer ravnovesnega viskoelastičnega dela in  $\alpha = neq$  za primer ne-ravnovesnega viskoelastičnega dela. Za modeliranje viskoznega dela uporabimo preprost viskozni psevdo-potencial  $\Phi$  [8, 9, 12], ki ga lahko zapišemo kot funkcijo  $\mathbf{I}_v$

$$\Phi = \eta \mathbf{I}_v : \mathbf{I}_v, \quad (3)$$

kjer sta  $\eta$  dinamična viskoznost, ki ustreza produktu neravnovesnega strižnega modula in viskoelastičnega časa relaksacije napetosti  $\eta = \mu_{neq} \tau$ , in  $\mathbf{I}_v = 1/2 (\mathbf{d}_v + \mathbf{d}_v^T)$ , ki je simetrični del viskoznega gradienta hitrosti. Z uporabo relacij  $\mathbf{F}_{eq,e} = \mathbf{F}_g^{-1} \mathbf{F}$  in  $\mathbf{F}_{neq,e} = \mathbf{F}_g^{-1} \mathbf{F} \mathbf{F}_v^{-1}$  lahko Rayleighjev potencial izrazimo kot funkcijo pomikov  $\mathbf{u}$  in hitrosti  $\dot{\mathbf{u}}$  (z uporabo deformacijskega gradienta  $\mathbf{F} = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{I}$  in njegove hitrosti  $\dot{\mathbf{F}} = \nabla \dot{\mathbf{u}}$ ), notranjih spremenljivk viskoznega levega

Cauchy-Greenovega tenzorja  $\mathbf{C}_v$  in njegove hitrosti  $\dot{\mathbf{C}}_v$ , tj.

$$\mathcal{P}(\mathbf{u}, \mathbf{C}_v, \dot{\mathbf{C}}_v) = \int_{\Omega_0} (\Psi_{\text{eq}}(\mathbf{C}_g^{-1}\mathbf{C}) + \Psi_{\text{neq}}(\mathbf{C}_g^{-1}\mathbf{C}\mathbf{C}_v^{-1}) + \Phi(\dot{\mathbf{C}}_v\mathbf{C}_v^{-1})) J_g d\Omega_0. \quad (4)$$

Za izračun polja pomikov  $\mathbf{u}$  in notranjih spremenljivk  $\mathbf{C}_v$  poiščemo ekstrem Rayleighovega potenciala z uporabo variacijskega računa,

$$\delta \mathcal{P}_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}, \mathbf{C}_v, \dot{\mathbf{C}}_v) = \mathbf{0} \quad \text{in} \quad \delta \mathcal{P}_{\dot{\mathbf{C}}_v}(\mathbf{u}, \mathbf{C}_v, \dot{\mathbf{C}}_v) = \mathbf{0}. \quad (5)$$

Iz prvega pogoja dobimo ravnovesno enačbo, iz drugega pa pogoj enakosti napetosti ne-ravnovesnega elastičnega in viskoznega dela SLS modela (glej sliko 1).

## 2.1 Časovno odvisno obremenjevanje in viskoelastična relaksacija napetosti

Pokazali bomo, da je odziv viskoelastičnih struktur močno pogojen z načinom obremenjevanja v času, tj. obliko časovne obremenitvene funkcije. Pri tem kot primer vzamemo vzdolžno rast filma, ki jo modeliramo kot neomejeno linearno funkcijo, omejeno linearno funkcijo, ter koračno funkcijo, ki je limiten primer omejene linearne funkcije, pri kateri je hitrost rasti neskončna, dokler ne doseže končne vrednosti. Omenjene funkcije rasti so podane z naslednjimi izrazi

$$\varepsilon_g(t; \dot{\varepsilon}_g, \bar{\varepsilon}_g) = \begin{cases} 0, & 0 \leq t < t_0, \\ \dot{\varepsilon}_g(t - t_0), & t_0 \leq t < \bar{t}, \\ \bar{\varepsilon}_g, & t \geq \bar{t}, \end{cases} \quad (6)$$

kjer je  $\bar{t} = \varepsilon_g / \dot{\varepsilon}_g + t_0$ . Vsiljena vzdolžna deformacija zaradi rasti je v našem kontinuumskem visko-hiperelastičnem modelu podana v obliki gradienta rasti, tj.  $F_{g,11} = 1 + \varepsilon_g(t)$ .

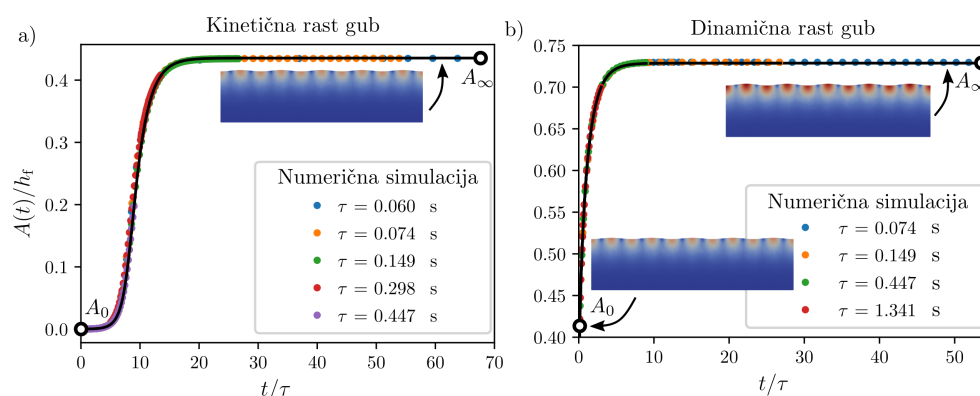
## 3 Rezultati

Za reševanje primera evolucije deformacijskih vzorcev tankega elastičnega filma na viskoelastični podlagi smo uporabili predpostavko ravninskega deformacijskega stanja in predstavljen visko-hiperelastični model (5) poenostavili na 2D, s preprostima predpostavkama  $\partial(\cdot)/\partial X_3 = 0$  in  $u_3 = \text{const}$ . Tako prvi del sistema enačb zapisan v (5)<sub>1</sub> vsebuje le še 2 enačbi in 2 neznanke  $u_x$  in  $u_y$ . Podobno drugi del sistema enačb (5)<sub>2</sub> tako vsebuje le 3 neodvisne enačbe in 3 neznanke  $C_{v,xx}$ ,  $C_{v,xy}$  in  $C_{v,yy}$ . Za reševanje nelinearnega sistema parcialnih diferencialnih enačb uporabimo metodo končnih elementov [13]. Uporabimo diskretizacijo domene s 1000 trikotnimi končnimi elementi tretje stopnje s 15 vozlišči, ki zaradi visoke stopnje interpolacije omogočajo obravnavo skoraj nestisljivih materialov ( $v_{\text{eq}} = v_{\text{neq}} = 0.49$ ). Za časovno diskretizacijo smo uporabili implicitno časovno diskretizacijsko shemo in Newton-Rhapsonovo metodo za izračun evolucije deformacijskih vzorcev.

### 3.1 Obremenjevanje s koračno funkcijo

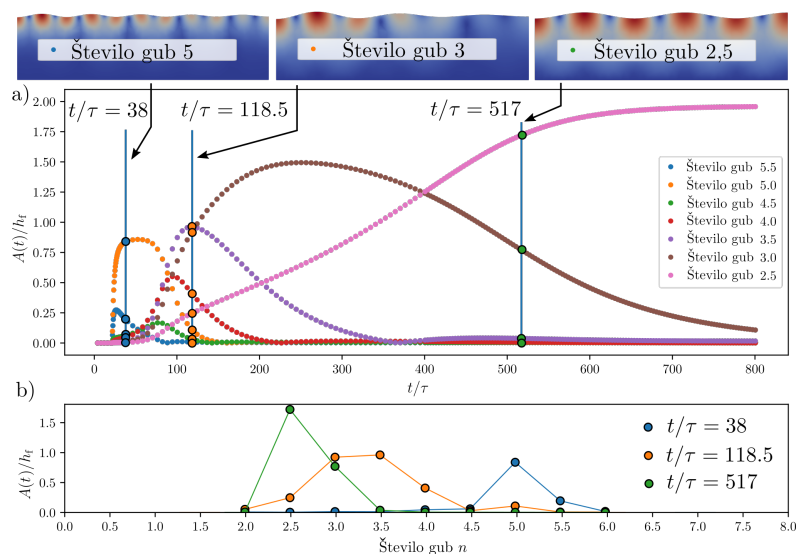
Ko sistem obremenimo s koračno funkcijo vzdolžne rasti in je zaradi izbire parametrov viskoelastičnosti substrate razlika med takojšnjim odzivom viskoelastičnega substrata na deformacijo ( $\sigma^0 := \lim_{t \rightarrow 0} \sigma(t)$ ) in končnim ravnovesnim odzivom viskoelastičnega substrata na deformacijo ( $\sigma^\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} \sigma(t)$ ) majhna, se v sistemu razvije le en deformacijski način. Glede na velikost koračne obremenitve poznamo tri fazna območja:

- i) Brez gubanja: ko je deformacija zaradi rasti manjša od kritične končne ravnovesne meje deformacije  $\varepsilon_g < \varepsilon_{cr}^\infty$ , se v sistemu gubanje ne pojavi;
- ii) Kinetično gubanje: ko je deformacija zaradi rasti večja od kritične končne ravnovesne meje deformacije in manjša od takojšnje kritične meje gubanja  $\varepsilon_{cr}^\infty < \varepsilon_g < \varepsilon_{cr}^0$ , se v sistemu s časom začne razvijati deformacijski vzorec (glej sliko 2a));
- iii) Dinamično gubanje: ko je vsiljena deformacija zaradi rasti večja od takojšnje meje gubanja  $\varepsilon_g > \varepsilon_{cr}^0$ , se v sistemu takoj pojavijo gube, ki se s časom še razvijajo, dokler sistem ne doseže ravnovesnega stanja (glej sliko 2b)).



**Slika 2:** a) Rast enega deformacijskega načina zaradi vzdolžne deformacije rasti filma v kinetični fazi za različne časovne konstante viskoelastične relaksacije substrata, kjer je  $\bar{\varepsilon} = 0.10$ . b) Rast enega deformacijskega načina zaradi vzdolžne deformacije rasti v dinamični fazi, ki se nadaljuje v kinetično fazo rasti deformacijskih vzorcev za različne časovne konstante viskoelastične relaksacije substrata, kjer je  $\bar{\varepsilon} = 0.14$ . Dolžina vzorca v obeh simulacijah je bila  $L = 200$  mm, višina substrata  $H = 59$  mm in debelina filma  $h_f = 1.2$  mm z Youngovim modulom  $E_f = 1$  MPa. Razmerje  $\mu_s^0 = 3.859 \times 10^{-3} \mu_f$  in razmerje  $\mu_s^0 / \mu_s^\infty = 8$ . Pri tem je bilo Poissonovo razmerje  $\nu_f = \nu_s^0 = \nu_f^\infty = 0.49$ .

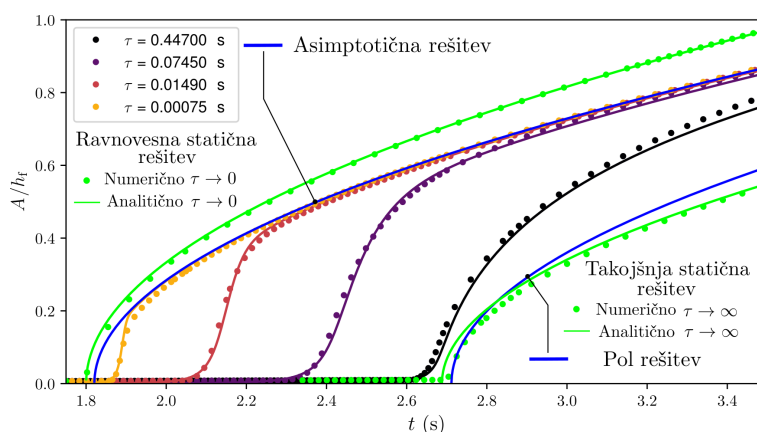
V primeru, ko film obremenimo s koračno funkcijo rasti, ki ima tako veliko amplitudo, da v sistemu povzroča kinetično gubanje  $\varepsilon_{cr}^\infty < \varepsilon_g < \varepsilon_{cr}^0$ , in sta  $\sigma^0$  in  $\sigma^\infty$  substrat zelo različna, se v sistemu najprej razvije amplitudni spekter deformacijskih vzorcev z majhnimi valovnimi dolžinami, ki se nato počasi v procesu tekmovanja med deformacijskimi načini razvije v amplitudni spekter z večjimi valovnimi dolžinami, kot kaže slika 3a). Na sliki 3b), kjer opazujemo amplitudni spekter deformacijskega vzorca vidimo za različne stopnje viskoelastične relaksacije substrata, da se na začetku, ko je napetostni odziv podlage večji, razvije deformacijski vzorec z manjšo valovno dolžino gub, proti koncu, ko se napetosti v substratu relaksirajo, pa se v sistemu pojavijo deformacijski vzorci z večjo valovno dolžino. V sistemu opazimo, da relaksacija napetosti in prerazporejanje valovne dolžine v sistemu trajata veliko dlje ( $\approx 600\tau$ ), kot viskoelastična relaksacija gradiva samega ( $\approx 4\tau$ ). Razlog za to veliko podaljšanje relaksacijskega časa je v tem, da sistem z rastjo vnešeno energijo sprosti tudi s pomočjo disipacije povezane z izgubo stabilnosti in gubanjem in ne le zaradi viskoelastične disipacije napetosti. Ker ima tako zguban sistem manj energije, se zato gube prerazporejajo zelo počasi.



**Slika 3:** a) Razvoj amplitudnega spektra v času pri korajnem obremenjevanju sistema. b) Amplitudni spekter deformacijskega vzorca za različne čase med razvojem deformacijskega vzorca. Parametri simulacije so bili enaki kot na sliki 2a), le da je razmerje  $\mu_s^0/\mu_s^\infty = 27$ .

### 3.2 Obremenjevanje z omejeno in neomejeno linearno funkcijo

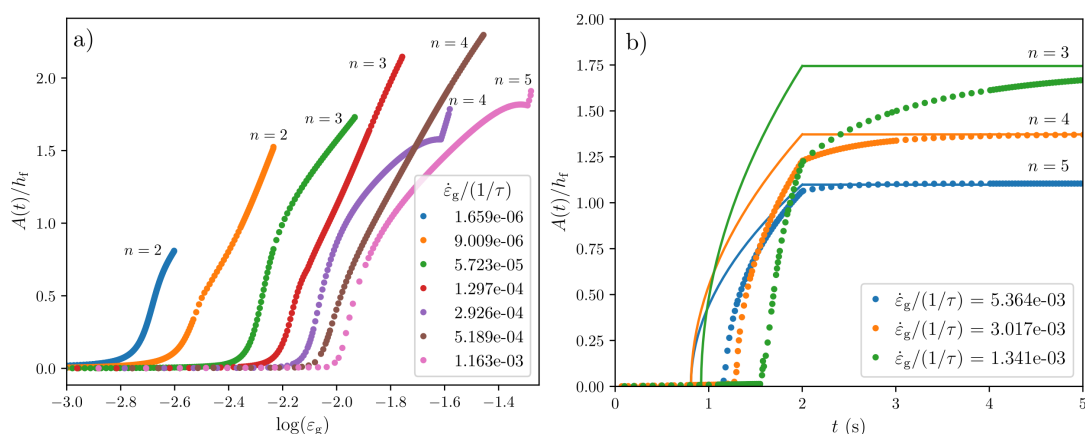
Pri obremenjevanju sistema s časovno linearno funkcijo deformacije zaradi rasti, ki ima podobno takojšnjo  $\sigma^0$  in končni ravnovesni odziv  $\sigma^\infty$ , se v odvisnosti od začetnih imperfekcij in časovne relaksacijske konstante substrata  $\tau$  začne prehodno časovno območje gubanja, kot kaže slika 4. Gubanje se lahko najprej začne pri času  $t_\infty$  in najkasneje pri času  $t_0$ . Po prehodnem časovnem obdobju se amplituda gub ustali in narašča bolj enakomerno.



**Slika 4:** Razvoj amplitude deformacijskega vzorca z le eno amplitudo zaradi neomejene linearne funkcije vzdolžne deformacije zaradi rasti  $\epsilon_g = \dot{\epsilon}_g t$ . V simulacijah je  $\dot{\epsilon}_g = 0.004 \text{ s}^{-1}$ , ostali parametri pa so enaki kot na sliki 2.



Pri obremenjevanju sistema, ki ima močno različen takojšnji  $\sigma^0$  in končni ravnovesni odziv  $\sigma^\infty$ , s časovno linearno funkcijo rasti se v sistemu za različna razmerja hitrosti rasti in hitrosti viskoelastične relaksacije substrata  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  razvijejo deformacijski vzorci z različnimi valovnimi dolžinami gub. Ko je prikazano na sliki 5a), se v sistemu z večjim razmerjem  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  pojavi deformacijski vzorec z manjšo valovno dolžino, saj se na hitrejši obremenitvi substrat odzove bolj togo. Ko sistem na sliki 5b) obremenimo z omejeno linearno funkcijo rasti, opazimo, da se v sistemu v prehodnem časovnem obdobju glede na razmerje  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  razvijejo deformacijske oblike z različnimi valovnimi dolžinami. Opazimo tudi, da so končni deformacijskih vzorci v teh sistemih različni, čeprav razmerje  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  neposredno vpliva le na prehodni del deformacij. Opazimo torej, da način obremenjevanja (razmerje hitrosti in relaksacije napetosti  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$ ) posredno vpliva na to, v katero od mnogih lokalno stabilnih deformacijskih stanj se bo sistem razvil, saj vodi razvoj deformacij do enega od lokalnih minimumov deformacijske energije.



**Slika 5:** a) Razvoj najizrazitejše normirane amplitude  $A/h_f$  deformacijskih vzorcev s številom gub  $n$  za različna razmerja hitrosti rasti in hitrosti viskoelastične relaksacije substrata  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  pri linearni funkciji rasti filma. b) Razvoj najizrazitejše normirane amplitude  $A/h_f$  deformacijskih vzorcev s številom gub  $n$  za različna razmerja hitrosti rasti in hitrosti viskoelastične relaksacije substrata  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  pri omejeni linearni funkciji rasti filma, kjer se izkaže, da razmerje  $\dot{\epsilon}_g/(1/\tau)$  vpliva tudi na končni deformacijski vzorec. Parametri simulacije so enaki kot na sliki 4, končna deformacija zaradi rasti pa je  $\bar{\epsilon}_g = 0.018$ .

#### 4 Zaključek

Razvili smo model za modeliranje velikih deformacij visko-hiperelastičnih struktur, ki temelji na SLS modelu in neo-Hooke-ovem modelu hiperelastičnosti. Jedro modela temelji na multiplikativni dekompoziciji gradienta velikih deformacij na dele povezane z obremenitvijo, ravnovesno in neravnovesno elastičnostjo ter viskoznostjo. Teorijo lahko uporabimo za modeliranje splošnih viskoelastičnih struktur, ki so obremenjene s poljubnimi časovno odvisnimi obremenitvami. Za osnovno analizo interakcije viskoelastičnosti in multistabilnosti smo se osredotočili na gubanje tankega elastičnega filma na viskoelastičnem substratu, kjer smo predpostavili rav-

ninsko deformacijsko stanje. Struktura je bila obremenjena s prostorsko obremenjeno, časovno odvisno homogeno rastjo v smeri nevtralne ravnine filma. Problem je bil rešen numerično, z uporabo metode končnih elementov in metode Newton-Rhapsonove iteracije.

Pri analizi razvoja deformacij sistema, ki je bil obremenjen s koračno funkcijo deformacije zaradi rasti in kjer sta takojšen in ravnovesni odziv substrata podobna  $\sigma^\infty \approx \sigma^0$ , smo glede na velikost obremenitve pri koračni funkciji odkrili dve različni fazi gubanja: kinetično (počasno) in dinamično (hitro) fazo. Pri analizi sistema, kjer sta takojšen in ravnovesni odziv substrata močno različna  $\sigma^0 \gg \sigma^\infty$ , pa smo opazovali tekmovanje med deformacijskimi načini, kjer najprej prevladujejo takšni z manjšo valovno dolžino, kasneje pa takšni z večjo valovno dolžino. Pri analizi sistema, obremenjenega s časovno neomejeno linearno funkcijo deformacije zaradi rasti in kjer sta takojšen in ravnovesni odziv substrata podobna  $\sigma^\infty \approx \sigma^0$ , smo opazili določen časovni okvir, v katerem se pojavi gubanje. Pred tem časovnim območju gubanje še ni mogoče, saj napetosti v sistemu še niso večje od kritičnih, po tem območju pa so napetosti že tako visoke, da se sistem zguba že prej. V sistemu pod enakimi pogoji, le da sta bila takojšen in ravnovesni odziv substrata močno različna  $\sigma^0 \gg \sigma^\infty$ , smo v sistemu pri različnih razmerjih hitrosti rasti in viskoelastične relaksacije opazili prehodne in končne deformacijske vzorce z različnimi valovnimi dolžinami. To pomeni, da način na katerega obremenjujemo sistem odloča o tem v kateri izmed mnogih deformacijskih vzorcev se bo razvil sistem.

S pomočjo razvitega matematičnega model in izsledkov študije bo mogoče bolj temeljito in dosledno opisati in napovedati obnašanje viskoelastičnih struktur, tudi bolj zapletenih oblik. Izsledki bodo omogočili nove načine izdelave naprednih funkcionalnosti, ki so povezane s povečanjem togosti struktur s hitrostjo obremenitve, kot sta balistična zaščita in pametne cestne ovire ter izgubo stabilnosti v aplikacijah, kot so zvočna in vibracijska izolacija ter absorpcija udarnih valov.

## Literatura

- [1] A. Sabbah et. al. Superhydrophobic surfaces created by elastic instability of PDMS. *Applied Science*, 6(5):1–8, 2016.
- [2] P. Lin et. al. Mechanically tunable dry... *SMOABF*, 4:1830–5, 2008.
- [3] R. Truby et. al. Soft somatosensitive actuators via embedded 3d printing. *Advanced Matter*, 30(15):1–8, 2018.
- [4] K. Goodwin et al. Smooth muscle differentiation... *Development*, 146(22), 2019.
- [5] R. Huang. Kinetic wrinkling of an elastic film... *JMPS*, 53:63–, 01 2005.
- [6] D. A. Matoz-Fernandez et. al. Wrinkle patterns in active viscoelastic thin sheets. *Phys. Rev. Research*, 2:013165, Feb 2020.
- [7] M. Ben Amar and A. Goriely. Growth and instability... *JMPS*, 53:2284–2319, 10 2005.
- [8] M. Hrapko et. al. The mechanical behavior... *Biorheology*, 43:623–36, 02 2006.
- [9] L. Bilston et. al. Large strain behaviour... *Biorheology*, 38:335–45, 02 2001.
- [10] T. A. Carniel and E. A. Fancello. Modeling the local viscoelastic behavior... *Lat. Am. J. Solids Struct.*, 14:844–860, 2017.
- [11] R. W. Ogden. *Non-Linear Elastic Deformations*. Dover, 2013. ISBN 9780486318714.
- [12] T. Prevost et. al. Biomechanics of brain tissue. *Acta Biomater.*, 7(1):83–95, January 2011.
- [13] A. Logg et. al. *Automated solution of differential equations...*, volume 84. 04 2011.



## *Dinamika kavitacijskega mikromehurčka ob togi steni*

Jure Zevnik<sup>1</sup>, Žiga Pandur<sup>1</sup> in Matevž Dular<sup>1</sup>

### *Cavitation microbubble dynamics near a rigid wall*

**Povzetek.** Nedavno odkritje pojava hitrega in tankega curka ob kolapsu kavitacijskega mehurčka v ekstremni bližini toge površine kaže na novo nišo v širokem področju dinamike mehurčkov. Omejnjeni pojav je bil do sedaj pokazan samo za večje makro mehurčke, medtem ko njegov obstoj pri mikromehurčkih (radij  $\approx 1 - 10 \mu\text{m}$ ) ostaja neraziskan. S tem namenom v danem prispevku numerično naslavljamo dinamiko posameznih kavitacijskih mikromehurčkov ob togi steni, kjer se primarno osredotočamo na vpliv, ki ga ima parameter  $\gamma$  (razmerje razdalje med mehurčkom in steno ter maksimalnim radijem mehurčka) na način kolapsa mehurčka in na lastnosti nastalih curkov. Rezultati kažejo na pojav dveh izrazito različnih načinov kolapsa mehurčkov. Za mikromehurčke v zmerni bližini stene ( $\gamma \gtrsim 0.4$ ) lahko opazimo nastanek klasičnega curka (vršna hitrost  $\sim 65 \text{ m/s}$ ) proti steni, medtem ko mikromehurčki v ekstremni bližini stene ( $\gamma \lesssim 0.3$ ) razvijejo zelo tanek in hiter igličast curek (vršna hitrost  $\sim 1300 \text{ m/s}$ ) proti steni. Dobljeni rezultati kažejo dobro ujemanje z eksperimentalnimi, kar poleg skladnosti s predhodnim delom drugih raziskovalcev kaže na ustreznost uporabljenega numeričnega pristopa in odpira nove možnosti uporabe opaženega pojava v različnih aplikacijah.

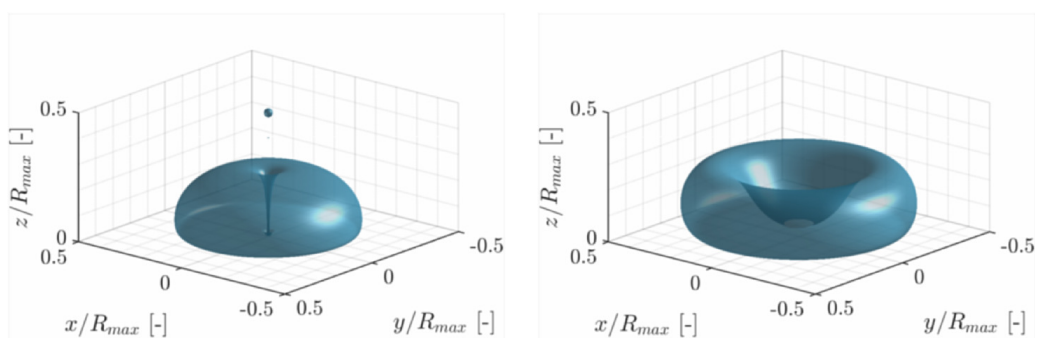
**Abstract.** The recent discovery of the phenomenon of a fast and thin jet during the collapse of a cavitation bubble in extreme proximity to a rigid surface points to a new niche in the broad field of bubble dynamics. So far, this phenomenon has been demonstrated only for larger macrobubbles, while its existence for microbubbles remains unexplored. For this reason, the present paper numerically addresses the dynamics of single cavitation microbubbles (radius  $\approx 1 - 10 \mu\text{m}$ ) in the vicinity of a rigid wall. The main focus is on the influence of parameter  $\gamma$  (ratio of bubble-wall distance and maximal bubble radius) on the occurrence of different bubble collapse modes and on the properties of the resulting jets. The results indicate the occurrence of two distinctly different modes of bubble collapse. For microbubbles in moderate wall proximity ( $\gamma \gtrsim 0.4$ ), we can observe the formation of a classical jet (peak velocity  $\sim 65 \text{ m/s}$ ) towards the wall, while bubbles in extreme wall proximity ( $\gamma \lesssim 0.3$ ) develop a very thin and fast needle-like jet (peak velocity  $\sim 1300 \text{ m/s}$ ) towards the wall. The obtained results show good agreement with the experimental work, which, in addition to consistency with previous research, indicates the validity of the numerical methodology used and opens new possibilities for the use of the observed phenomenon in various applications.

---

<sup>1</sup> Univerza v Ljubljani, Fakulteta za strojništvo

## 1 Uvod

Kavitacija je pojav pri katerem nenaden padec tlaka povzroči nastanek parnih in plinastih mehurčkov v kapljevini. Nastale plinaste strukture so navadno nestabilne in ob prehodu nazaj v območje povišanega tlaka silovito implodirajo, t.j. skolapsirajo, same vase, kar privede do številnih inženirskih problemov, kot so erozija materiala, hrup in vibracije vodnih in turbinskih strojev [7]. To je verjetno eden izmed glavnih razlogov, da je bila dinamika posameznih kavitacijskih mehurčkov v bližini toge stene tema številnih raziskav v zadnjih 50 letih. Do sedaj je bilo splošno sprejeto, da mehurčki med kolapsom ob togih površinah razvijejo značilni enoosni curek proti steni (Slika 1, desno), ki naj bi dosegel hitrosti do 100 m/s in premer od 10-30 % maksimalne velikosti mehurčka [6]. Posledično bil pojav curka prepoznal kot eden izmed glavnih dejavnikov, ki prispevajo k eroziji materiala v vodnih in turbinskih strojih ter na ladijskih vijakih [7]. Po drugi strani pa je bil kmalu prepoznal velik potencial za uporabo kavitacije v različnih pomembnih aplikacijah na področju biologije, kemije, medicine in varstva okolja [18, 8, 5]. Pojav curkov je bil tako do sedaj predlagan kot aktivni mehanizem za čiščenje površin [4] in kontrolirano poracijo celic [13]. Šele pred kratkim so Lechner et al. [10] z numerično raziskavo pokazali, da mehurčki (maksimalni radij  $R_{max} \approx 500 \mu\text{m}$ ) v skrajni bližini toge površine ( $\gamma = 0.048$ , parameter  $\gamma = z_0/R_{max}$  je definiran kot začetna razdalja  $z_0$  med centrom mehurčka in steno normirana z maksimalnim radijem mehurčka  $R_{max}$ ) razvijejo zelo hiter in tanek igličast curek proti steni (Slika 1, levo). Slednji naj bi dosegel hitrosti reda 1000 m/s in lokalno povzročil udarne tlake na površini krepko v območju GPa. Kasnejša analiza avtorjev [11] kaže na kritično vrednost parametra  $\gamma$  za razvoj hitrega in tankega curka  $\gamma^* \approx 0.2$ , kar je v skladu s prejšnjimi eksperimentalnimi opazovanji [2, 15]. Avtorji prav tako poročajo o ključnem pomenu viskoznosti okoliške kapljevine za nastanek igličastega curka, saj mehurčki v skrajni bližini stene ( $\gamma \approx 0$ ) v neviskoznom mediju med kolapsom ohranijo hemisferično obliko. Novo odkriti fenomen je bil nedavno tudi eksperimentalno potrjen z raziskavami Reuterja in Ohla [16], ki poročata o tvorbi igličastega curka za parameter razdalje med steno in mehurčkom  $\gamma < 0.17$  in o pojavu klasičnega curka za  $\gamma > 0.23$ . Avtorja prav tako poudarjata, da viskoznost vidno vpliva na dinamiko mehurčkov ob steni, kar pomeni, da



**Slika 1:** Prikaz obeh karakterističnih načinov kolapsa kavitacijskega mehurčka ob togi steni ( $z = 0$ ): formacija igličastega curka proti steni (levo,  $\gamma = 0.27$ ) in razvoj klasičnega "počasnega" curka (desno,  $\gamma = 0.59$ ).

so podane mejne vrednosti parametra  $\gamma$  veljavne samo za mehurčke z maksimalnim radijem  $R_{max} \approx 600 \mu\text{m}$ . Znano je namreč, da so viskozni učinki pogojeni z velikostnim merilom in da njihova magnituda narašča z manjšimi mehurčki. Pojav hitrega igličastega curka je tako še vedno neraziskan za manjše mehurčke, t.i. mikromehurčke ( $R_{max} \sim 1 - 10 \mu\text{m}$ ), ki imajo široko uporabo v industriji, biologiji in medicini. Med drugim jih zasledimo pri tarčni dostavi zdravil, odstranjevanju biofilmov, čiščenju membran in v procesih čiščenja vode [17]. Na danem merilu je pomemben dejavnik tudi površinska napetost, ki manjšim mehurčkom zavira deviacijo iz začetne krogelne oblike in ima blažilni učinek na itenziteto kolapsa mehurčkov [19]. Dani prispevek tako numerično naslavlja dinamiko posameznega kavitacijskega mikromehurčka ob togi steni. Osredotočamo se predvsem na vpliv, ki ga ima brezdimenzijska razdalja med mehurčkom in steno  $\gamma$  na lastnosti curka razvitega med kolapsom mikromehurčka. Uvodu sledi kratek opis numeričnega modela. Nato so predstavljeni in diskutirani dobljeni rezultati. V zaključku povzemamo glavne ugotovitve in komentiramo možnosti za nadaljnje raziskovalno delo.

## 2 Numerični model

Uporabljen je numerični model [1], ki temelji na metodi končnih volumnov in metodi volumen fluida za razrešitev dvofaznega stisljivega toka. Podoben pristop je bil v preteklosti uspešno uporabljen in validiran za razrešitev dinamike kavitacijskih mehurčkov pri različnih robnih pogojih [14, 19, 20, 21]. Njegova prednost leži v zmožnosti upoštevanja viskoznega in stisljivega toka, kar je pomemben dejavnik v danem primeru. Dodatni prednosti metode volumen fluida je njena konservativnost in zmožnost zajema medfazne meje tudi v primeru, ko ta ne tvori enostavno povezane oblike. V splošnem lahko dinamiko kavitacijskega mehurčka matematično opišemo z zakoni o ohranitvi mase, gibalne količine in energije. V danem primeru upoštevamo dve tekoči fazi - plinasti mehurček in okoliško kapljevino. Količine in lastnosti posamezne faze so označene z podpisanim indeksom  $i$ , kjer  $g$  označuje plinasto fazo,  $l$  pa okoliško kapljevino. Njuno fazno mejo zajamemo z reševanjem kontinuitetne enačbe za skalarno polje prostorninskega deleža  $\alpha_l$  okoliške kapljevine (enačba (1)).

$$\frac{\partial (\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{U}_l) = 0 \quad (1)$$

Tukaj  $\rho_l$  in  $\mathbf{U}_l$  označujeta gostoto in hitrostno polje kapljevinate faze. Prostorninski delež  $\alpha_g$  plinaste faze dobimo preko izraza  $\alpha_g = 1 - \alpha_l$ . Na podlagi znanih prostorninskih deležev določimo volumsko povprečene materialne lastnosti  $\phi$  skozi celotno računsko domeno kot  $\phi = \sum_{i=g,l} \alpha_i \phi_i$ . V danem primeru to velja za gostoto  $\rho$ , dinamično viskoznost  $\mu$  in toplotno prevodnost  $k$ . Na podlagi znanih materialnih lastnosti lahko rešimo gibalno enačbo (2) in energijsko enačbo (3), česar rezultat sta skupno hitrostno  $\mathbf{U}$  in temperaturno  $T$  polje.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{b} \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\mathbf{U} (\rho e + p)) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3)$$

Tukaj  $p$  označuje tlak,  $\mathbf{b}$  masne sile,  $\boldsymbol{\tau}$  tenzor viskoznih napetosti in  $e$  skupno specifično energijo. V danem primeru obravnavamo Newtonske tekočine, vpliv površinske napetosti na fazni

**Tabela 1:** Upoštevane materialne lastnosti obeh tekočin pri temperaturi  $T = 20^\circ\text{C}$ .

Okoliška kapljevina - voda		Plinasti mehurček - zrak	
Količina [enota]	Vrednost	Količina [enota]	Vrednost
Referenčni tlak [Pa]	101325	Spec. plinska konstanta [J/(kg K)]	287
Referenčna gostota [kg/m <sup>3</sup> ]	998.2	Dinamična viskoznost [Pa s]	$1.8 \times 10^{-5}$
Referenčni modul stisljivosti [Pa]	$2.2 \times 10^9$	Toplotna prevodnost [W/(m K)]	0.0242
Taitov eksponent gostote [-]	7.15		
Dinamična viskoznost [Pa s]	$1 \times 10^{-3}$		
Toplotna prevodnost [W/(m K)]	0.6		
Površinska napetost [N/m]	0.0728		

meji pa modeliramo skladno z modelom kontinuirane površinske sile [3] preko člena masne sile  $\mathbf{b}$  v gibalni enačbi. Stisljivost okoliške kapljevine je zajeta preko Taitove enačbe stanja [12], medtem ko plinasto fazo modeliramo kot idealni plin. Dejansko upoštevane materialne lastnosti obeh faz so zbrane v tabeli 1. Rast prvotno stabilnega mikromehurčka (začetni polmer  $R_0 = 1.1 \mu\text{m}$ ) dosežemo preko inicializacije notranjosti mehurčka z nadtlakom ( $p_0 = 1.96 \times 10^8 \text{ Pa}$ , določen s pomočjo preliminarnih simulacij) v primerjavi s tlakom okolice ( $p_\infty = 101325 \text{ Pa}$ ). Center mehurčka je od stene oddaljen med  $z_0 = 1.5 \mu\text{m}$  in  $15 \mu\text{m}$ , kar v danem primeru ( $R_{max} \approx 15 \mu\text{m}$ ) pomeni, da brezdimenzijska razdalja med centrom mehurčka in steno  $\gamma = z_0/R_{max}$  zajema vrednosti med 0.087 and 1.02 (inkrement  $\Delta\gamma \approx 0.1$ ). Simulacije so izvedene na ortogonalni mreži ( $\Delta x = 44 \text{ nm}$ ,  $R_0/\Delta x = 25$  in  $R_{max}/\Delta x \approx 370$ ) in z upoštevanjem osne simetrije. Skupno število računskih celic se giblje okrog pol milijona. Časovni korak je definiran preko pogoja maksimalnega Courantovega števila 0.2. Robni pogoj na robu računske domene je upoštevan kot tlačni izpust z opcijo prepuščanja tlačnih valov ( $p_\infty = 101325 \text{ Pa}$ ,  $T_\infty = 273.15 \text{ K}$ ). Na togi steni upoštevamo robni pogoj brez zdrsa.

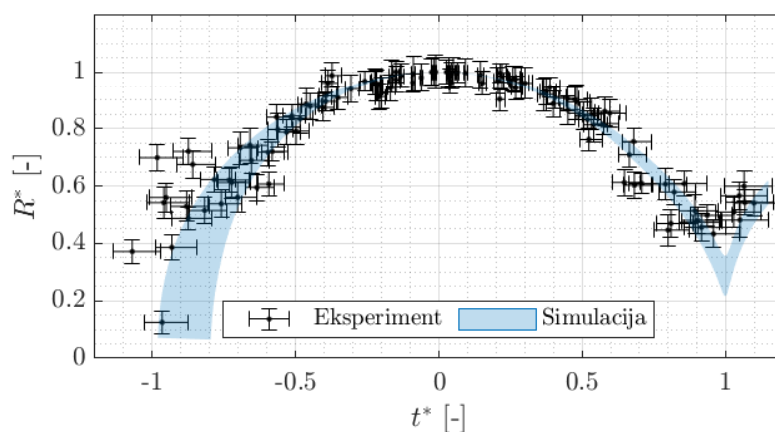
### 3 Rezultati in diskusija

Zaradi lažje medsebojne primerjave med evalviranimi primeri so nekateri rezultati v danem razdelku podani v brezdimenzijski obliki. Radiji mehurčka  $R$  in pripadajoči časi  $t$  so podani kot  $R^* = R/R_{max}$  in  $t^* = (t - t_{max})/t_c$ , kjer  $R_{max}$  in  $t_{max}$  označujeta maksimalni radij mehurčka in pripadajoči čas, ter  $t_c$  čas kolapsa mehurčka. Prav tako je pomembno dejstvo, da v danem primeru z izrazom radij mehurčka označujemo razdaljo od centra simetrijske osi ( $r = 0$ ) do zunanega roba mehurčka (glej Sliko 3), saj mehurčki tekom obstoja ne ohranijo krogelne oblike. Skupno je bilo izvedenih deset simulacij ( $0.087 \leq \gamma \leq 1.02$ ), njihove rezultate pa lahko v grobem povzamemo z naslednjimi dobljenimi parametri:  $R_{max} = 16.3 \pm 0.5 \mu\text{m}$ ,  $t_{max} = 1.58 \pm 0.05 \mu\text{s}$  in  $t_c = 1.73 \pm 0.07 \mu\text{s}$ . Dobljene rezultate smo primerjali z eksperimentalnimi rezultati ( $10 < R_{max} < 25 \mu\text{m}$ ,  $0.20 \leq \gamma \leq 0.46$ ,  $N=24$ ) dobljenimi preko vizualizacije dinamike mikromehurčkov ob togi steni s hitro kamero (Photron SA-Z type 2100K-M-64GB, časovna resolucija  $1.44 \times 10^6$  slik na sekundo, prostorska resolucija  $0.33 \mu\text{m/piksel}$ ). Slednji v danem prispevku niso podrobneje metodološko opisani in so prikazani le z namenom validacije dobljenih numeričnih rezultatov. Primerjava rezultatov je podana na sliki 2, iz kjer lahko razberemo dober nivo ujemanja, še posebej če upoštevamo tehnične omejitve na obravnavanih časovnih in prostorskih merilih. Kljub temu lahko v začetnem delu rasti mehurčka

( $t^* < -0.9$ ) opazimo nekaj večjih odstopanj. Slednje lahko pojasnimo z dejstvom, da eksperimentalni mehurčki rastejo skladno z okoliškim nihanjem tlaka, kar je v nekaterih primerih privedlo do počasnejše ekspanzije mehurčkov. Ker nas v danem delu zanimajo predvsem lastnosti mehurčkov in curkov med kolapsom ( $t^* \approx 1$ ), opažene razlike tu ne igrajo pomembne vloge.

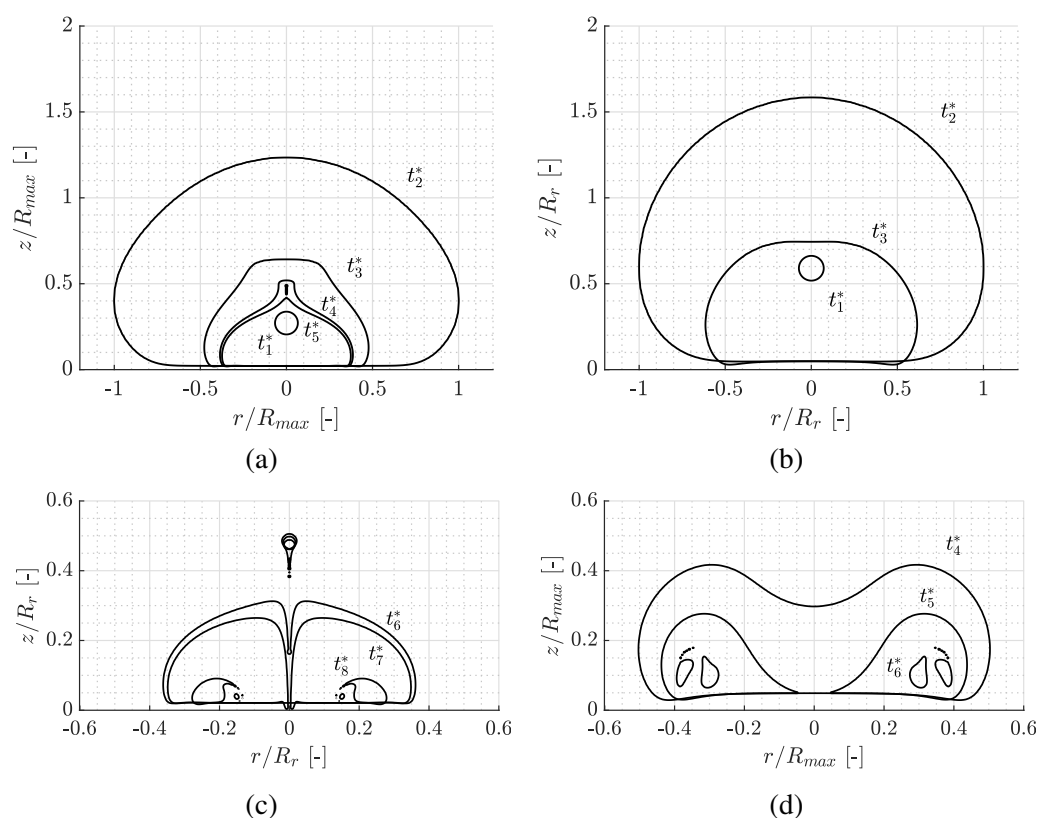
Nadaljnja analiza časovnega poteka oblike mehurčkov je pokazala dva različna karakteristična načina kolapsa mehurčka, ki sta primarno odvisna od vrednosti parametra razdalje  $\gamma$  med mehurčkom in steno. Časovno sosledje oblike mehurčka (stranski pogled, presek skozi ravnino  $r$ - $z$ ) je za oba prepoznana načina kolapsa prikazano na sliki 3. Oba načina vključujeta pojav enoosnega curka proti steni, vendar se lastnosti razvitih curkov med seboj zelo razlikujejo (slika 1). Za mikromehurčke v zmerni bližini stene ( $\gamma \gtrsim 0.4$ ) lahko opazimo nastanek klasičnega curka proti steni (slika 3b in 3d) z radijem  $R_{jet}/R_{max} = 0.30 \pm 0.02$  (velikost vzorca  $N=6$ ), kar se dobro ujema z rezultati eksperimentov ( $R_{jet}/R_{max} = 0.27 \pm 0.4$ ,  $N=6$ ). Vršne hitrosti curkov se gibljejo med 56 in 75 m/s ( $64 \pm 8$  m/s,  $N=6$ ), kar je skladno s številnimi prejšnjimi eksperimentalnimi in numeričnimi študijami [7, 9, 6, 11]. Po drugi strani pa mehurčki v ekstremni bližini stene ( $\gamma \lesssim 0.3$ ) razvijejo zelo hiter in tanek igličast curek (vršna hitrost  $1305 \pm 76$  m/s,  $R_{jet}/R_{max} = 0.021 \pm 0.001$ ,  $N=3$ , sliki 3a in 3c) proti steni. To dobro sovпада z dejstvom, da pri eksperimentalnih mehurčkih s pomočjo vizualizacije nismo zasledili razvoja curka za vse mehurčke z  $\gamma < 0.25$ . Slednji se namreč pojavijo izven dosegljive časovne ( $\Delta t = 0.7 \mu s$ ) in prostorske ( $0.33 \mu m/pm$ ) resolucije eksperimentov. Tudi tukaj dobljene karakteristike razvitih curkov sovpadajo s prejšnjimi študijami z mehurčki na makro merilu [10, 11, 16]. Za obravnavan primer z  $\gamma = 0.37$  smo opazili t.i. tranzicijsko obnašanje z vršno hitrostjo curka 192 m/s.

Izračunane vršne hitrosti curkov v odvisnosti od parametra  $\gamma$  so zbrane na sliki 4. Iz dobljenih rezultatov lahko opazimo, da vršne hitrosti tankih curkov ( $\gamma \lesssim 0.3$ ) skoraj dosežejo hitrosti



**Slika 2:** Časovni potek radija mehurčka  $R^*$ . Vrednosti so podane v brezdimenzijski obliki. Eksperimentalni rezultati ( $0.20 \leq \gamma \leq 0.46$ ,  $N=24$ ) so označeni s črnimi točkami. Ocenjena merska napaka ( $\pm 2 \text{ px} = \pm 0.67 \mu m$ ) je označena s črnimi ročajmi. Rezultati numeričnih simulacij ( $0.18 \leq \gamma \leq 0.48$ , inkrement  $\Delta\gamma \approx 0.1$ ,  $N=4$ ) so podani z modrim polnilom, ki predstavlja ovjono dobljenih rezultatov.

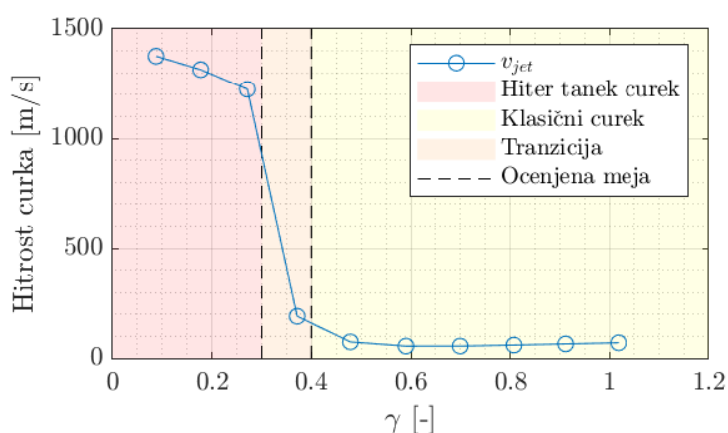
zvoka v vodi ( $\sim 1500$  m/s), medtem ko v relativno ozkem tranzicijskem območju ( $0.3 \lesssim \gamma \lesssim 0.4$ ) preidejo pod 100 m/s. Iz tega lahko sklepamo, da sta si oba načina kolapsa mehurčkov med seboj izrazito različna. Igljasti curki nastanejo kot posledica radialnega krčenja zgornjega dela mehurčka (slika 3a). To privede do konvergentnega radialnega toka, kar rezultira v trčenju sten mehurčka na območju simetrijske osi ( $r = 0$ ) in fokusiranju toka v igličast curek proti površini (slika 3c). Po drugi strani pa je pojav klasičnega curka pogojen s fokusiranjem toka vzdolž



**Slika 3:** Časovni razvoj oblike mehurčka (stranski pogled) za primer: (a, c) kolapsa z razvojem igličastega curka proti steni:  $\gamma = 0.27$ ,  $R_{max} = 16.6 \mu\text{m}$ ,  $t_{max} = 1.57 \mu\text{s}$  in  $t_c = 3.31 \mu\text{s}$ . Rezultati so podani v brezdimenzijski obliki. Konture prikazujejo obliko v začetnem stanju ( $t_1^* = -0.899$ ), pri maksimalni velikosti mehurčka ( $t_2^* = 0$ ), ter tekom kolapsa v času, ko mehurček doseže polovico maksimalne velikosti ( $t_3^* = 0.895$ ), pri formiranju konice ( $t_4^* = 0.947$ ), njenem odtrganju ( $t_5^* = 0.952$ ), čemur sledi formacija hitrega in tankega curka ( $t_6^* = 0.958$ ), udarec curka v steno ( $t_7^* = 0.964$ ) in kolaps preostalega torusnega dela mehurčka ( $t_8^* = 1.004$ ); (b, d) za primer kolapsa z razvojem klasičnega "počasnega" curka proti steni:  $\gamma = 0.59$ ,  $R_{max} = 15.3 \mu\text{m}$ ,  $t_{max} = 1.59 \mu\text{s}$  in  $t_c = 3.29 \mu\text{s}$ . Rezultati so podani v brezdimenzijski obliki. Konture prikazujejo obliko v začetnem stanju ( $t_1^* = -0.943$ ), pri maksimalni velikosti mehurčka ( $t_2^* = 0$ ), ter tekom kolapsa v času, ko mehurček doseže polovico maksimalne velikosti ( $t_3^* = 0.831$ ), v času formacije curka ( $t_4^* = 0.920$ ), udarca curka v steno ( $t_5^* = 0.961$ ), čemur sledi kolaps preostalega torusnega mehurčka ( $t_6^* = 1.008$ ).



simetrijske osi v smeri proti steni. Ocenjene kritične vrednosti za pojav posameznega načina kolapsa mehurčka ( $\gamma^* \approx 0.3$  in  $0.4$ ) so blizu dobljenim vrednostim numeričnih [10, 11] in eksperimentalnih [16] študij na večjih makro mehurčkih ( $R_{max} = 500 - 600 \mu\text{m}$ ). Lechner et al. [11] poročajo o pojavu tranzicijskega režima pri  $\gamma$  med  $0.20$  in  $0.24$ , medtem ko Reuter in Ohl [16] podajata mejne vrednosti pri  $\gamma^* = 0.17$  in  $0.23$ . Razlog za opaženo razliko bi lahko bil večji vpliv viskoznih sil in površinske napetosti pri kolapsu mikromehurčkov napram mahurčkom na večjem merilu. Kot že rečeno so viskozni učinki ključnega pomena za nastanek igličastega curka [11, 16], saj bi v primeru neviskozne okoliške kapljevine kolapsirajoči mehurčki ohranili hemisferično obliko. To pa posledično nebi privedlo do konvergentnega radialnega toka v zgornjem delu mehurčka in kasnejšega fokusiranja toka v curek proti steni.



**Slika 4:** Vršne hitrosti curka v odvisnosti od parametra  $\gamma$ . Identificirani načini kolapsa mehurčka so označeni z barvnim ozadjem, z ocenjeno mejo (črna črtkana črta) pri  $\gamma^* \approx 0.3$  in  $0.4$  za razvoj igličastega in klasičnega curka.

#### 4 Zaključek

V danem prispevku smo numerično naslovili dinamiko posameznih kavitacijskih mikromehurčkov ob togi steni. Primarno smo se osredotočili na vpliv parametra razdalje med mehurčkom in steno  $\gamma$  na način kolapsa mehurčka in na lastnosti nastalih curkov. Rezultati so pokazali na pojav dveh izrazito različnih načinov kolapsa mehurčkov. Za mikromehurčke v zmerni bližini stene ( $\gamma \gtrsim 0.4$ ) lahko opazimo nastanek klasičnega curka (vršna hitrost  $\sim 65 \text{ m/s}$ ) proti steni, medtem ko mehurčki v ekstremni bližini stene ( $\gamma \lesssim 0.3$ ) razvijejo zelo tanek in hiter igličast curek (vršna hitrost  $\sim 1300 \text{ m/s}$ ) proti steni. Dobljeni rezultati kažejo dobro ujemanje z eksperimentalnimi, kar poleg skladnosti s predhodnim delom drugih raziskovalcev [10, 11, 16] kaže na ustreznost uporabljenega numeričnega pristopa. V primerjavi z prejšnjimi študijami na večjih makro mehurčkih je bilo opaženo manjše odstopanje pri ocenjenih kritičnih vrednostih  $\gamma^*$  za pojav posamezne vrste curka, kar lahko do neke mere razložimo z različnim vplivom viskoznih sil na različnih velikostnih merilih. Bolj rigorozno razlago prepuščamo nadaljnjemu delu, ki vključuje tudi preučitev možnosti implementacije pojava hitrega igličastega curka v različnih bioloških, industrijskih in okoljskih aplikacijah.

## Literatura

- [1] ANSYS®. Fluent, Release 2021 R2, Help System, Fluent Theory Guide, 2021.
- [2] T. B. Benjamin and A. T. Ellis. The Collapse of Cavitation Bubbles and the Pressures thereby Produced against Solid Boundaries. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 260(1110):221–240, may 1966.
- [3] J. U. Brackbill et al. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, 1992.
- [4] G. L. Chahine, et al. Modeling of surface cleaning by cavitation bubble dynamics and collapse. *Ultrasonics Sonochemistry*, 29:528–549, 2016.
- [5] M. Dular et al. Use of hydrodynamic cavitation in (waste)water treatment. *Ultrasonics Sonochemistry*, 29:577–588, 2016.
- [6] M. Dular et al. High speed observation of damage created by a collapse of a single cavitation bubble. *Wear*, 418-419(Jan):13–23, jan 2019.
- [7] J.-P. Franc and J.-M. Michel. *Fundamentals of Cavitation*, volume 76 of *Fluid Mechanics and Its Applications*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2005.
- [8] T. Ikeda et al. Focused ultrasound and lithotripsy. In *Advances in Experimental Medicine and Biology*, volume 880, pages 113–129. 2016.
- [9] M. Koch et al. Numerical modeling of laser generated cavitation bubbles with the finite volume and volume of fluid method, using OpenFOAM. *Computers and Fluids*, 126:71–90, 2016.
- [10] C. Lechner et al. Fast, thin jets from bubbles expanding and collapsing in extreme vicinity to a solid boundary: A numerical study. *Physical Review Fluids*, 4(2):21601, feb 2019.
- [11] C. Lechner et al. Jet formation from bubbles near a solid boundary in a compressible liquid: Numerical study of distance dependence. *Physical Review Fluids*, 5(9):093604, sep 2020.
- [12] Y.-H. Li. Equation of state of water and sea water. *Journal of Geophysical Research*, 72(10):2665–2678, 1967.
- [13] Z. G. Li et al. Single cell membrane poration by bubble-induced microjets in a microfluidic chip. *Lab on a Chip*, 13(6):1144–1150, 2013.
- [14] U. Orthaber et al. Cavitation bubble collapse in a vicinity of a liquid-liquid interface – Basic research into emulsification process. *Ultrasonics Sonochemistry*, 68:105224, nov 2020.
- [15] A. Philipp and W. Lauterborn. Cavitation erosion by single laser-produced bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, 361:75–116, apr 1998.
- [16] F. Reuter and C. D. Ohl. Supersonic needle-jet generation with single cavitation bubbles. *Applied Physics Letters*, 118(13):134103, apr 2021.
- [17] J. Rodríguez et al. Generation of microbubbles with applications to industry and medicine, jan 2015.
- [18] K. S. Suslick. Sonochemistry. *Science*, 247(4949):1439–1445, mar 1990.
- [19] J. Zevnik and M. Dular. Cavitation bubble interaction with a rigid spherical particle on a microscale. *Ultrasonics Sonochemistry*, 69:105252, 2020.
- [20] J. Zevnik and M. Dular. Liposome destruction by a collapsing cavitation microbubble: A numerical study. *Ultrasonics Sonochemistry*, 78:105706, oct 2021.
- [21] J. Zevnik and M. Dular. Cavitation bubble interaction with compliant structures on a microscale: A contribution to the understanding of bacterial cell lysis by cavitation treatment. *Ultrasonics Sonochemistry*, 87:106053, jun 2022.

CIP - Kataložni zapis o publikaciji (CIP) pripravili v Narodni in univerzitetni knjižnici v Ljubljani

COBISS.SI-ID 121542403

ISBN 978-961-93859-7-5 (PDF)