National Conference with International Participation
ENGINEERING MECHANICS 2003
Svratka, Czech Republic, May 12 – 15, 2003

paper no. **312**

VARIATIONAL FORMULATION OF THE SOLUTION OF COMPOSITES USING BEM

P. Procházka*

Summary: *Certain numerical methods are direct impact of classical variational principles. The finite element method is a typical example of such approaches. Some problems, particularly moving boundary problems, optimal shape design, or optimal control could prefer the boundary element method. In the paper variational problems leading to the use of boundary elements are formulated. The aim of optimizations are optimal shapes of fibers in composite structures under different conditions. The defived principles should serve as a staerting point for this.*

1 Úvod

Některé numerické metody jsou přímým důsledkem klasických variačních principů, jako je Lagrangeův nebo Castiglianův. Typickým příkladem je metoda konečných prvků, kterou lze formulovat buď z výše uvedených principů nebo z derivace funkcionálů vnitřní a vnější energie (slabé řešení). Pro některé úlohy, zvláště úlohy s pohyblivou hranicí, je vhodné využít metody okrajových prvků, která za jistých okolností nevyžaduje bližší znalost o diskretizaci oblasti (oblastí). Problém spočívá v tom, že MOP vychází z velmi slabého řešení se speciální volbou testovacích funkcí a vede na integrální rovnice, ze kterých je nesnadné získat potřebné energetické funkcionály. V příspěvku budou odvozeny variační principy pro kompozity "s pláštěm", které jsou vhodné pro výrobu kostních implantátů.

V tomto případě se jedná o zajištění vhodného přechodu mezi matricí a vlákny. Tím se sníží gradient napětí mezi oběma fázemi, který je způsoben náhlou změnou v materiálových vlastnostech a může způsobit rozpojení a tím snížení únosnosti celého kompozitu. Toto zmírnění gradientu napětí může být způsobeno jednak přirozenou cestou, a to chemickou polymerací mezi oběma fázemi, jednak uměle. V obou případech je výpočtem indikováno, jak by mělo materiálové chování být co nejpříznivější. Vychází se z měření a lokalizací, která byla provedena a zveřejněna v předchozích publikacích autora.

V předloženém příspěvku jsou řešeny problémy návrhů variačních úloh tak, aby funkcionály byly psány pro integrály definované pouze na okrajích. Cíl je zřejmý: dosáhnout

*Prof. Ing. RNDr. Petr Procházka, DrSc. České vysoké učení technické, Fakulta stavební, katedra stavební mechaniky, Thákurova 7, 166 29 Praha 6, e-mail: petrp@fsv.cvut.cz

formulací a řešení variačních problémů pro použití metody okrajových prvků, viz Banerjee, Butterfield 1981 nebo Brož, Procházka 1996. Obecně dostaneme poměrně komplikované systémy pro řešení těchto úloh, ale pro určité typy jsou právě okrajové prvky vhodným nástrojem řešení. Mezi takové úlohy patří úlohy s volnou hranicí nebo úlohy o optimálním tvaru. U těchto úloh jsou návrhové parametry voleny jako funkce tvaru hranice, nebo přímo parametry geometrie hranice, viz např. Seguchi, Tada 1981 a Tada, Seguchi, Soh 1986.

Z hlediska numerického řešení uvedených úloh je nutné rozlišit dva základní kroky:
1. výběr strategie řešení,
2. numerická metoda řešení fyzikálního problému.

V současnosti úroveň počítačů i numerických postupů pro řešení rozsáhlých systémů rovnic umožňuje řešení velmi komplikovaných úloh. Tím je možné snižovat především spotřebu materiálu, ale i spotebu energie a není zanedbatelné, že i čas, potřebný k výstavbě konstrukce je ekonomičtější. Přirozeně naopak lze i zvýšit únosnost konstrukcí.

Na druhé straně se variační formulace založené na okrajových integrálech příliš nehodí na oprimalizaci tvaru uvnitř definiční oblasti. V tomto případě jasně převládá metoda konečných prvků. Obecně platí, že pokud je úloha zaměřena na pohyb uvnitř oblasti, metoda konečných prvků je vhodnější, naopak pro pohyb hranice je vhodnější formulace pro okrajové prvky.

2 Formulace problému

2.1 Základní úvahy

Problémy optimálního tvaru nebo pohyblivé hranice mohou být obecně formulovány takto: Nechť např. pole posuvů **u** je řešení parciální diferenciální rovnice (nebo ekvivalentně je řešení variačního principu) v oblasti Ω. Nechť $E(\mathbf{u},\Omega)$ je reálná funkce argumentů. Problém optimálního tvaru nebo pohyblivé hranice sestává v hledání takové definiční oblasti z třídy Θ přípustných funkcí, která minimalizuje E. Toto lze symbolicky zapsat takto:

$$\text{Min } \{E(\mathbf{u},\Omega);\ A(\mathbf{u},\Omega)=0\} \tag{1}$$

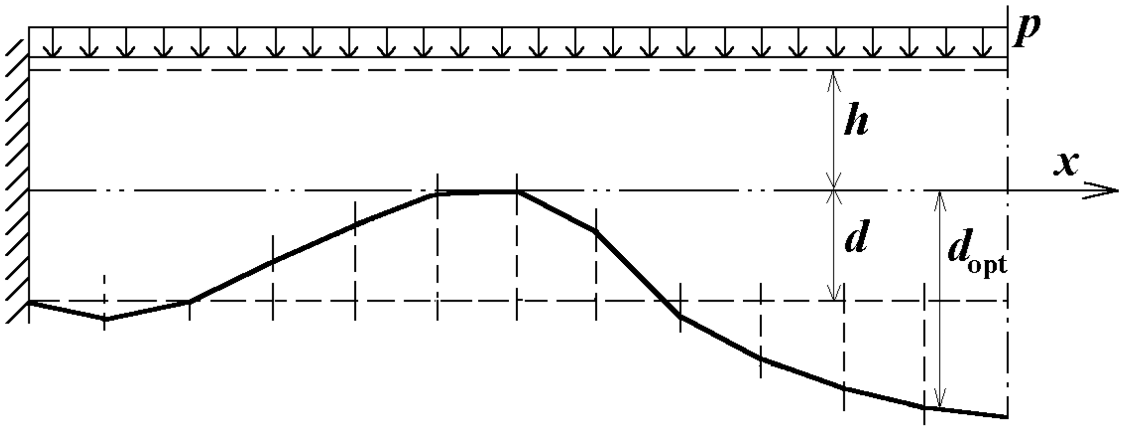
kde A je operátor která pro každý stav Ω jednoznačně určuje pole posuvů **u**.

Jedním z praktických a rozumných požadavků projektantů ja předpoklad o minimální deformační teorii konstrukcí zatížení několika typem vnějšího zatížení. Aby bylo možné zajistit korektnost takovéto úlohy, je nutné, aby byly splněny dodatečné vazabné podmínky. V našem případě se užívá podmínky stálého objemu v 3D nebo stálé plochy ve 2D. V tomto případě je nutné provést hlubší rozbor této podmínky. Jednak tato podmínka zajišťuje jednoznačnost úlohy, bez zavedené této podmínky není optimalizační úloha nebo úloha o pohyblivé hranici konvergující. Tato podmínka se jeví na první pohled jako značně omezující návrhové možnosti. Ve skutečnosti tomu tak není, je totiž možné „uvolnit" i velikost objemu a hledat optimální řešení na pohyblivém objemu. V případě kompozitů se uvažuje pouze konstantní objem, daný objemovým zastoupením vláken v kompozitu. Druhý problém spočívá v integrální formulaci vedlejší podmínky (objem nebo plocha jsou vyjádřeny integrály nebo integrálními součty). Přestože je úloha o minimalizaci E z hlediska konstrukčního rozumná, nemusí jej být dosaženo, lze zajistit pouze určitou konvergenci. Proto se zavádějí ještě další dodatečné podmínky, zastavující iterační proces řešení úloh v nejakém rozumném bodě. Typickým případem je optimální tvar tloušťky obdélníkové stěna, vetknuté na obou koncích nebo konzola, viz obr. 1 a obr. 2. Původní tvar je vždy obdélníkový a vyznačený na obrázcích čárkovanou čarou.

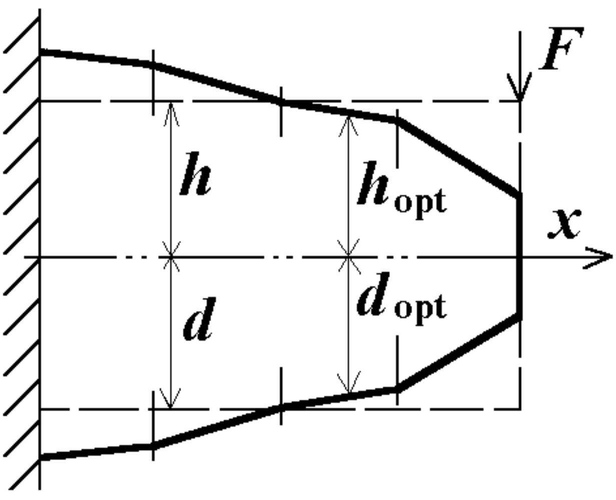
V tomto případě je vhodné volit přípustné množiny takto:

$$\Theta = \{\Omega;\ \text{meas}\ \Omega = C,\ \left|\frac{dh}{dx}\right| \le C_h, \left|\frac{dd}{dx}\right| \le C_d\} \tag{2}$$

kde C, C_h a C_d jsou (rozumně) vybrané konstanty a $h = h(x)$, $d = d(x)$ jsou funkce popisující hranice jak ve výchozím stavu, viz obr. 1 a 2, tak i v jednotlivých iteračních stavech, které by měly konvergovat k cílovému tvaru za vedlejších podmínek předepsaných například ve (2).



Obr. 1 Optimální tloušťka vetknuté stěny zatížené rovnoměrným zatížením p.



Obr. 2 Optimální tloušťka vetknuté konzolové stěny zatížené osamělou silou F.

Jinou vhodnou možností volby přípustné množiny je tato, která vede na omezení tlouštěk stěny:

$$\Theta = \{\Omega;\ \text{meas}\ \Omega = C,\ h \le C_h, d \le C_d\} \qquad (3)$$

Podmínka stálosti objemu definiční oblasti může být zabudována do jakostního funkcionálu buď přirozenou cestou přes Lagrangeovy multiplikátory, eventuálně přes penalizační funkce, nebo můžeme postulovat funkcionál bez omezení, ale definovaný na kompletní přípustné množině Θ.

2.2 Primární variační principy vyjádřené pomocí hraničních hodnot

Napišme nyní klasický Lagrangeův princip s vazbou na objem definiční oblasti:

$$\Pi(u,\Omega) = \frac{1}{2}\int_{\Omega}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}d\Omega - \int_{\Gamma p}u_i\overline{p}_i d\Gamma + \lambda(\int_{\Omega}d\Omega - C) \rightarrow \text{stationární} \qquad (3)$$

resp. bez vazby:

$$\Pi(u,\Omega) = \frac{1}{2}\int_{\Omega}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}d\Omega - \int_{\Gamma p}u_i\overline{p}_i d\Gamma \rightarrow \quad \text{minimální} \qquad (4)$$

kde u_i, ε_{ij} a σ_{ij}, i, j = 1,2,3, jsou po řadě složky vektoru posuvů, tenzoru deformací a tenzoru napětí. $\overline{p_i}$ jsou předepsané povrchové síly. Navíc posuvy vyhovují předepsaným hodnotám na hranici.

V dalším se pro jednoduchost soustředíme na jakostní funkcionál (4), přičemž rozšíření na (3) lze provést pouhým připojením posledního členu ve (3).

Užitím Greenovy věty na funkcionál (4), při využití lineárních geometrických rovnic a statické přípustnosti a symetrie napětí obdržíme ekvivalentní funkcionál ke (4) ve tvaru:

$$\Pi(u,\Omega) = \frac{1}{2}\int_{\Gamma p}u_i\overline{p}_i d\Gamma + \frac{1}{2}\int_{\Gamma u}\overline{u}_i p_i d\Gamma - \int_{\Gamma p}u_i\overline{p}_i d\Gamma \qquad (5)$$

Objemový integrál se tedy podařilo odstranit. Nyní provedeme některé úpravy, které povedou na vyjádření variačního principu (4) v podobném tvaru, ale pouze s integrálními členy. Po dalších úpravách snadno dostaneme:

$$\Pi(u,\Omega) = -\frac{1}{2}\int_{\Gamma p}u_i\overline{p}_i d\Gamma + \frac{1}{2}\int_{\Gamma u}\overline{u}_i p_i d\Gamma = \frac{1}{2}\int_{\Gamma}u_i p_i d\Gamma - \int_{\Gamma p}u_i\overline{p}_i d\Gamma \qquad (6)$$

Aproximujme hraniční posuvy a povrchové síly takto:

$$u_i(x) = \Phi_{ij}(x)U_j, \qquad v_i(x) = \Psi_{ij}(x)P_j \tag{7}$$

kde Φ_{ij} a Ψ_{ij} jsou matice interpolací (bázových funkcí) příslušných posuvům resp. povrchovým silám na hraničních prvcích. Vektory U_i a P_i $i = 1,...,n$, jsou hodnoty posuvů a povrchových sil v uzlových bodech. Číslo n je počet stupňů volnosti v uzlových bodech. Pro homogenné materiál tělesa, které sledujeme, Clapeyronův teorém (velmi slabé řešení obecného variačního principu se specificky zvolenou bázovou funkcí) vede na rovnici, která může být zapsána takto, viz např. Banerjee, Butterfield nebo Brož, Procházka:

$$A_{ij}U_j = B_{ij}P_j \tag{8}$$

kde A_{ij} a B_{ij} jsou čtvercové matice n x n. Navíc $\boldsymbol{B}$ je regulární matice, kterou lze tedy invertovat. Skutečně, jestliže posuvy u jsou předepsány všude podél hranice, povrchové síly jsou jednoznačně definovány. Matice $\boldsymbol{B}$ má tedy inverzní $\boldsymbol{B}^{-1}$ a můžeme tedy napsat alternativní rovnici k (8) takto:

$$P_i = B_{ij}^{-1}A_{jk}U_k = Z_{ik}U_k \tag{9}$$

Dosazením (9) do (7) a (6) dostaneme:

$$\Pi(u,\Omega) = \frac{1}{2}K_{ij}U_iU_j - F_iU_i \tag{10}$$

kde

$$K_{ij} = \int_{\Gamma}\Phi_{kl}(x)\Psi_{kj}(x)d\Gamma Z_{li}\ , \qquad F_i = \int_{\Gamma p}\Phi_{ji}(x)\overline{p}_j d\Gamma$$

2.3 Duální variační princip vyjádřený hraničními hodnotami

Výjdeme z principů podobných (3) resp. (4). V případě duálních variačních principů je nutné oba funkcionály nahradit těmito:

$$\Pi(\sigma,\Omega) = \frac{1}{2}\int_{\Omega}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}d\Omega - \int_{\Gamma_u}\overline{u}_i p_i d\Gamma + \lambda(\int_{\Omega}d\Omega - C) \rightarrow \text{stationární} \tag{11}$$

resp. bez vazby:

$$\Pi(\sigma,\Omega) = \frac{1}{2}\int_{\Omega}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}d\Omega - \int_{\Gamma_u}\overline{u}_i p_i d\Gamma \rightarrow \quad \text{minimální} \tag{12}$$

Užitím Greenovy věty dostaneme:

$$\Pi(\sigma,\Omega) = \frac{1}{2}\int_{\Gamma} u_i p_i d\Gamma - \int_{\Gamma_u} \bar{u}_i p_i d\Gamma \tag{13}$$

kde $p_i = \sigma_{ij} n_j$, n_j jsou složky vnější jednotkové normály. Funkcionál je nyní podobný funkcionálu pro primární variační princip, ale poslední integrál pravé strany se týká integrace přes tu část hranice, kde jsou předepsány posuvy. Je tedy třeba opět získat tuhost vyjadřující vztah mezi veličinami definovanými na hranici, tj. mezi posuvy a povrchovými silami.

Předpokládáme-li rovnováhu vnějších sil, tj. $\int_{\Omega} b_i d\Omega = \oint_{\Gamma} p_i d\Gamma$, pak lze použít i zde s výsledkem:

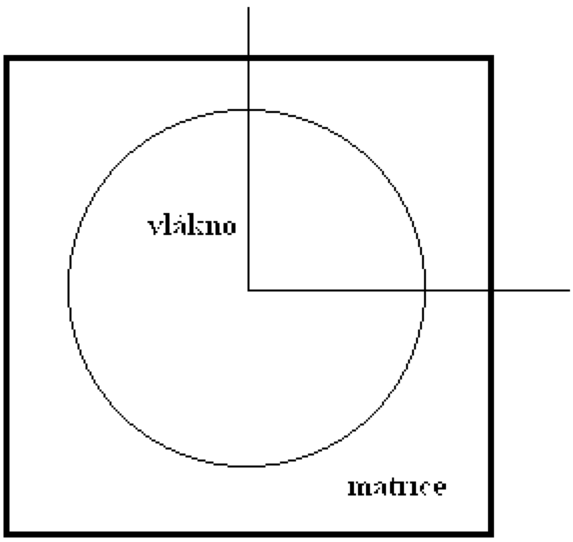
$$\Pi(u,\Omega) = \frac{1}{2} C_{ij} P_i P_j - P_i U_i \tag{14}$$

kde

$$C_{ij} = \int_{\Gamma} \Phi_{kl}(x) \Psi_{kj}(x) d\Gamma Z_{li}^{-1}, \qquad U_i = \int_{\Gamma_p} \Psi_{ji}(x) \bar{u}_j d\Gamma$$

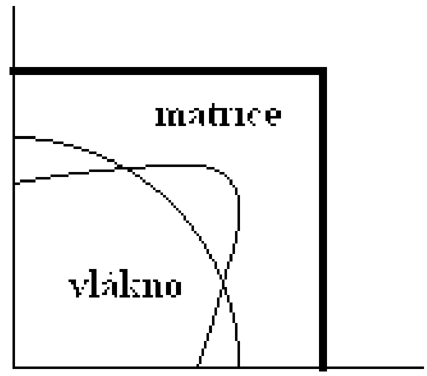
Příklad

Výše ukázaný postup je vhodný mj. pro optimalizaci tvaru vláken. Uvažujme periodickou jednotkovou buňku podle obr. 3. Vlákno je kruhového tvaru, jednotková buňka je pro jednoduchost čtvercová.



Obr. 3 Výchozí kruhový tvar vlákna v jednotkové periodické buňce

Optimální tvar je vykreslen na prvním kvadrantu jednotkové buňky na obr. 4.



Obr. 4 Optimální tvar vlákna s původním kruhovým tvarem

Je nutné poznamenat, že je potřebné zachovat stálou plochu vlákna. Za těchto okolností je vhodné použít algoritmů, které jsou známé z geodezie (planimetrie). Navíc se ukazuje, že hustota povrchové energie na kontaktu vlákna a matrice může být velmi rozdílná a v jednotlivých iteračních krocích je vhodné použít logaritmického měřítka. Toto zjištění bylo uveřejněno v (Seguchi & Tada, 1981) a (Tada, Seguchi & Soh).

Závěr

V předložené práci jsou odvozeny variační principy pro účely optimalizace, zvláště tvaru vláken v kompozitních materiálech. Jelikož se jedná o pohyhlivou hranici vlákna, je metoda okrajových prvků mimořádně vhodná. Je však nutné přeformulovat klasické variační principy tak, aby místo funkcionálů přes oblast bylo použito funkcionálů přes hranici. Tyto principy jsou odvozeny v jednotlivých kapitolách v předchozím textu. Tím se podaří zavést návrhové parametry, týkající se tvaru hranice vlákna, takovým způsobem, že platí vzájemně jednoznačná relace mezi body hranice a mezi těmito parametry. V případě symetrické periodické jednotkové buňky je přirozenou volbou vzdálenost bodů hranice vláken a středu buňky. V tom případě paprsky takto formulované jsou dobře definovány, neboť se ukazuje, že optimální tvary jsou „star-shaped“, tj. mají tvar hvězdice, přičemž existuje bod (střed buňky), ze kterého lze vést úsečku k libovolnému bodu oblasti vlákna s tím, že celá úsečka leží uvnitř této oblasti.

Lze dokázat, že neexistuje řešení optimálního tvaru pro kompozit s náhlými změnami materiálových vlastností. Proto je nutné zavést omezující podmínky, které zastaví iterační proces ve stavu, který je „nejbližší“ optimálnímu řešení. Jinak řečeno, fakticky matematického optima není dosaženo, ale technicky se jedná o nejlepší řešení.

Zajímavým problémem je řešení optimálního tvaru vláken na buňkách s více vlákny, s neperiodickými strukturami, apod. Tyto problémy jsou však velmi náročné jak na čas, tak i na teoretické formulace. Tyto závěry plynou z faktu, že než se přistoupí k vlastní optimalizaci je nutné látku lokalizovat a poté homogenizovat s respektováním obecného zatížení (v normálovém i tečném směru), viz např. (Procházka, 2000). Na štěstí platí aspoň pro periodické struktury tzv. Hillovo lemma, které značně situaci usnadní, neboť není nutné řešit kvadratické problémy plynoucí z kvadratických funkcionálů, ale je možné vycházet ze součinu dvou lineárních forem.

Literatura

Banerjee, P.K., Butterfield, R. (1981) *Boundary Element Methods in Engineering Science*, McGraw Hill, London, New York 1981.

Brož, P. Procházka, P. (1995) *Metoda okrajových prvků v technických aplikacích*, GRADA, Praha.

Seguchi, Y, Tada, Y. (1981) Shape deformation of Structure based on the Inverse Variational Principle, the Finite Element Approach. Proc. *Int. Symp. On Optimal Design*. Univ. of Arizona, 358 - 364.

Tada, Y., Seguchi, Y, Soh, T. (1986) Shape Determination Problem of Structures by the Inverse Variational Principle, Feasibility Study about Application to Actual Structures. *Builletin of JSME* 29, 253 - 262.

Procházka, P. (2001) *Základy mechaniky složených materiálů*. Academia Praha

Tento příspěvek byl připraven s finanční pomocí GAČR, projekt číslo 106/01/0535.