

文章编号: 1000-8055(2008)08-1443-06

水平集法在多相材料细观结构优化中的应用

孙 杰, 宋迎东, 孙志刚, 高希光
(南京航空航天大学 能源与动力学院, 南京 210016)

摘 要: 利用高精度通用单胞模型将多相材料的细观拓扑结构和宏观力学性能联系起来, 将一个单胞离散成有限个单元, 通过单元中材料的有无来描述细观结构, 利用水平集法将这个离散变量的拓扑优化问题转化为连续变量的形状优化问题, 从而实现了多相材料的细观结构优化. 以一种多相材料结构为例进行了细观结构的优化, 并获得了具有负泊松比的特性, 从而验证了所提出方法的合理性.

关 键 词: 多相材料; 细观结构; 水平集法; 通用单胞法

中图分类号: TB33

文献标识码: A

Application of level set method in microstructure optimization of multiphase material

SUN Jie, SONG Ying-dong, SUN Zhi-gang, GAO Xi-guang

(College of Energy and Power Engineering,

Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: Topological microstructure and macro-mechanic performance of multiphase materials were combined using high-fidelity generalized method of cell (HFGMC), so a single cell was dispersed into finite elements; the presence or otherwise of the microstructure was described by materials in the elements, and topological optimization of discrete variables was transferred into continuous variables' shape optimization, thus achieving microstructure optimization of multiphase materials. The microstructure of a multiphase material was optimized, and property of auxetic performance was obtained, helping to prove the validity of this method.

Key words: multiphase materials; microstructure; level set method; generalized method of cell

1994 年 Sigmund 根据逆均匀化方法率先提出了复合材料单胞细观结构拓扑优化设计思路^[1], 标志着复合材料细观结构优化设计理论的建立. 拓扑优化兼有尺寸和形状优化的复杂性, 细观结构最终拓扑形式是未知, 它基于逆均匀化理论追求一定的约束条件下的结构最佳布局, 并使其性能达到最优. 当前, 复合材料细观结构的拓扑优化设计已经成为复合材料研究领域的前沿课

题. 通过对微结构单胞进行拓扑优化设计可获得具有良好特性的复合材料, 例如负的泊松比^[2]、负的热膨胀系数^[3]、最优阻尼材料^[4]以及良好压电特性的压电材料^[5].

Hassani B, Hinton E 指出连续体拓扑优化问题本质上是一种 0-1 离散变量的组合优化问题^[6-7]. 由于数学模型中目标函数与约束函数的不连续性, 使得优化问题成为不可微和非凸的模型.

收稿日期: 2007-07-18; 修订日期: 2007-11-19

基金项目: 航空科学基金(05C52013); 973 项目

作者简介: 孙杰(1982-), 男, 江苏灌南人, 研究生, 主要研究方向为航空宇航推进系统结构、强度与振动.

水平集法(Level set method)正体现了这一思想,它通过一个嵌入到高维尺度中的隐式移动边界来表示优化问题,即结构的边界用嵌入到高维尺度函数中的水平集模型来表示,该模型在描述复杂结构的拓扑及边界变化方面具有较好的灵活性.本文采用水平集法来描述多相材料的细观结构,将复合形法作为优化手段,对多相材料的细观结构进行了优化,获得了具有负泊松比的特性.

1 高精度通用单胞模型

(HFGMC)^[8]

通用单胞法的基本思想是将代表性体元划分为若干个矩形子胞(Sub-cell),假设每个子胞的位移函数,通过子胞边界上的力和位移边界条件,建立宏观量场和细观量场之间的关系方程,根据已知的宏观量,求解细观量场,再根据子胞的几何方程以及物理方程,得到完整的子胞应力和应变场即细观力学解,最后根据均匀化方法获得代表性体元的宏观应力-应变之间的关系即本构关系.

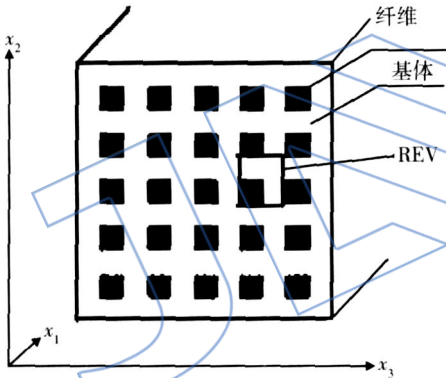


图 1 多相材料周期性细观结构

Fig. 1 Periodic microstructure of multiphase material

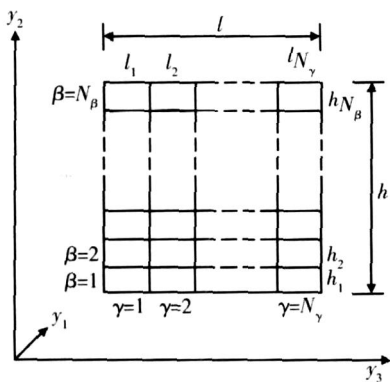


图 2 $N_{\beta} \times N_{\gamma}$ 规模单元

Fig. 2 RVE which contains $N_{\beta} \times N_{\gamma}$ sub elements

假设多相材料在 $x_2 - x_3$ 方向是周期排列的,如图 1 所示,将代表性体积单元(REV)(即单胞)

划分为 $N_{\beta} \times N_{\gamma}$ 个子胞,如图 2 所示.假设高精度通用单胞模型的位移为下列形式

$$u_i^{\beta\gamma} = \bar{\varepsilon}_{ij} x_j + W_{i(00)}^{(\beta\gamma)} + \bar{y}_2^{(\beta)} W_{i(10)}^{(\beta\gamma)} + \bar{y}_3^{(\gamma)} W_{i(01)}^{(\beta\gamma)} + \frac{1}{2} \left(3 \bar{y}_2^{(\beta)^2} - \frac{h_{\beta}^2}{4} \right) W_{i(20)}^{(\beta\gamma)} + \frac{1}{2} \left(3 \bar{y}_3^{(\gamma)^2} - \frac{l_{\gamma}^2}{4} \right) W_{i(02)}^{(\beta\gamma)} \quad (1)$$

其中: $i=1,2,3, 0 \leq y_2 \leq h, 0 \leq y_3 \leq l, W_{i(00)}^{(\beta\gamma)}$ 是可变的体积平均位移, $W_{i(mn)}^{(\beta\gamma)}$ ($m, n=0,1,2$) 为位移的高价项, h_{β}, l_{γ} 为子胞 (β, γ) 的尺寸, $\beta=1,2, \dots, N_{\beta}, \gamma=1,2, \dots, N_{\gamma}$.

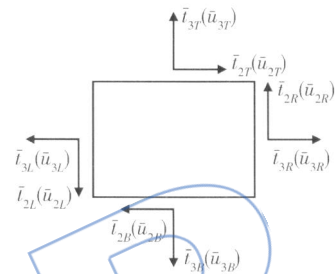


图 3 二维表面平均量的示意图

Fig. 3 Schematic of two-dimensional surface average displacement and stress

左表面的平均位移 $\bar{u}_{iL}^{(\beta, \gamma)}$ 定义为下列形式

$$\bar{u}_{iL}^{(\beta, \gamma)} = \frac{1}{l_{\gamma}} \int_{y_2}^{l_{\gamma}} u_i^{(\beta, \gamma)} \left(-\frac{h_{\beta}}{2}, \bar{y}_3^{(\gamma)} \right) d\bar{y}_3^{(\gamma)} \quad (2)$$

右、上、下表面的平均位移为

$$\begin{aligned} \bar{u}_{iR}^{(\beta, \gamma)} &= \frac{1}{l_{\gamma}} \int_{y_2}^{l_{\gamma}} u_i^{(\beta, \gamma)} \left(\frac{h_{\beta}}{2}, \bar{y}_3^{(\gamma)} \right) d\bar{y}_3^{(\gamma)} \\ \bar{u}_{iB}^{(\beta, \gamma)} &= \frac{1}{h_{\beta}} \int_{y_3}^{h_{\beta}} u_i^{(\beta, \gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta)}, -\frac{l_{\gamma}}{2} \right) d\bar{y}_2^{(\beta)} \\ \bar{u}_{iT}^{(\beta, \gamma)} &= \frac{1}{h_{\beta}} \int_{y_3}^{h_{\beta}} u_i^{(\beta, \gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta)}, \frac{l_{\gamma}}{2} \right) d\bar{y}_2^{(\beta)} \end{aligned} \quad (3)$$

把式(1)代入几何方程

$$\varepsilon_{ij}^{(\beta\gamma)} = \bar{\varepsilon}_{ij} + \frac{1}{2} (\partial_i u_j^{(\beta\gamma)} + \partial_j u_i^{(\beta\gamma)}) \quad (4)$$

其中 $\partial_1 = 0, \partial_2 = \partial / \partial \bar{y}_2^{(\beta)}, \partial_3 = \partial / \partial \bar{y}_3^{(\gamma)}$.

可得每个子胞的应变分量如下:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^{(\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{11} \\ \varepsilon_{22}^{(\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{22} + W_{2(10)}^{(\beta\gamma)} + 3 \bar{y}_2^{(\beta)} W_{2(20)}^{(\beta\gamma)} \\ \varepsilon_{33}^{(\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{33} + W_{3(01)}^{(\beta\gamma)} + 3 \bar{y}_3^{(\gamma)} W_{3(02)}^{(\beta\gamma)} \\ \varepsilon_{12}^{(\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{12} + \frac{1}{2} (W_{1(10)}^{(\beta\gamma)} + 3 \bar{y}_2^{(\beta)} W_{1(20)}^{(\beta\gamma)}) \\ \varepsilon_{13}^{(\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{13} + \frac{1}{2} (W_{1(01)}^{(\beta\gamma)} + 3 \bar{y}_3^{(\gamma)} W_{1(02)}^{(\beta\gamma)}) \\ \varepsilon_{23}^{(\beta\gamma)} &= \bar{\varepsilon}_{23} + \frac{1}{2} (W_{2(01)}^{(\beta\gamma)} + W_{3(10)}^{(\beta\gamma)}) + \frac{3}{2} (\bar{y}_2^{(\beta)} W_{3(20)}^{(\beta\gamma)} + \bar{y}_3^{(\gamma)} W_{2(02)}^{(\beta\gamma)}) \end{aligned} \quad (5)$$

子胞的本构方程为

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(\beta)} = \mathbf{S}^{(\beta)} \boldsymbol{\sigma}^{(\beta)} + \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e(\beta)} \quad (6)$$

其中 $\mathbf{S}^{(\beta)} = [\mathbf{C}^{(\beta)}]^{-1}$ 为子胞的柔度矩阵, $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e(\beta)}$ 为子胞的非弹性应变。

对于弹性材料, 胡克定律表示如下:

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \boldsymbol{\varepsilon}_{kl} \quad (7)$$

其中 C 是多相材料各相的刚度分量。

单位面积的力分量表示为

$$t_i^n = \sigma_{ij} n_j \quad (8)$$

界面的平均应力分量能用单位面积的力分量来表达。左表面的平均应力 $\bar{t}_{iL}^{(\beta, \gamma)}$ 定义成下列形式

$$\bar{t}_{iL}^{(\beta, \gamma)} = \frac{1}{l_\gamma} \int_{l_\gamma/2}^{l_\gamma/2} t_i^{n(\beta, \gamma)} \left(-\frac{h_\beta}{2}, \bar{y}_3^{(\gamma)} \right) d\bar{y}_3^{(\gamma)} \quad (9)$$

同理, 右、下、上表面的平均应力为

$$\begin{aligned} \bar{t}_{iR}^{(\beta, \gamma)} &= \frac{1}{l_\gamma} \int_{l_\gamma/2}^{l_\gamma/2} t_i^{n(\beta, \gamma)} \left(\frac{h_\beta}{2}, \bar{y}_3^{(\gamma)} \right) d\bar{y}_3^{(\gamma)} \\ \bar{t}_{iB}^{(\beta, \gamma)} &= \frac{1}{h_\beta} \int_{h_\beta/2}^{h_\beta/2} t_i^{n(\beta, \gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta)}, -\frac{l_\gamma}{2} \right) d\bar{y}_2^{(\beta)} \\ \bar{t}_{iT}^{(\beta, \gamma)} &= \frac{1}{h_\beta} \int_{h_\beta/2}^{h_\beta/2} t_i^{n(\beta, \gamma)} \left(\bar{y}_2^{(\beta)}, \frac{l_\gamma}{2} \right) d\bar{y}_2^{(\beta)} \end{aligned} \quad (10)$$

当结构处于平衡状态时, 子胞的应力场必须满足平衡方程, 平均意义下的平衡方程可表示为

$$\frac{1}{A(\beta)} \int_{h_\beta/2}^{h_\beta/2} \int_{l_\gamma/2}^{l_\gamma/2} \sigma_{ij}^{(\beta)} d\bar{y}_2^{(\beta)} d\bar{y}_3^{(\gamma)} = 0 \quad (11)$$

其中 $A(\beta)$ 为子胞的面积。

相邻子胞之间界面处的位移在平均意义上是连续的, 在第 β 个界面, 可表示为

$$\bar{u}_{iR}^{(\beta, \gamma)} = \bar{u}_{iL}^{(\beta+1, \gamma)} \quad (12)$$

其中 $\beta = 1, \dots, N_{\beta-1}, \gamma = 1, \dots, N_\gamma$ 。

在第 γ 个界面, 可表示为

$$\bar{u}_{iT}^{(\beta, \gamma)} = \bar{u}_{iB}^{(\beta, \gamma+1)} \quad (13)$$

其中 $\beta = 1, \dots, N_\beta, \gamma = 1, \dots, N_{\gamma-1}$ 。

由于代表性体积单元的位移边界条件具有周期性, 可以增加

$$\bar{u}_{iR}^{(N_\beta, \gamma)} = \bar{u}_{iL}^{(1, \gamma)}, \bar{u}_{iT}^{(\beta, N_\gamma)} = \bar{u}_{iB}^{(\beta, 1)} \quad (14)$$

在体积平均意义上, 相邻子胞间的应力连续条件, 在第 β 个子胞的各方向的应力必须满足

$$\bar{t}_{iR}^{(\beta, \gamma)} + \bar{t}_{iL}^{(\beta+1, \gamma)} = 0 \quad (15)$$

第 γ 个子胞的各方向的应力必须满足

$$\bar{t}_{iT}^{(\beta, \gamma)} + \bar{t}_{iB}^{(\beta, \gamma+1)} = 0 \quad (16)$$

根据边界条件周期性的特点, 当 $N_\beta + 1$ 和 $N_\gamma + 1$ 时均为 1。

由上面的方程联立可求解用宏观应变表示的细观应力分量, 代入

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{hl} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} h_{\beta l} \bar{\boldsymbol{\sigma}}^{(\beta, \gamma)} \quad (17)$$

再由 $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^* \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$, 就可以得到多相材料的本构关系 $\mathbf{C}^*$ 。

2 水平集法

水平集法的主要思想可以归结为: 不采用直接描述设计区域边界的方法, 而用一个镶嵌函数 $\Phi(x)$, $x \in R^n$ 隐含地描述边界。

以一个二维区域为例: 假设平面实体区域为 D , 另一个大得多的区域为 $\bar{D}$, 并且 $D \subset \bar{D}$ 。镶嵌函数 $\Phi(x, t)$ 定义在 $\bar{D}$ 上, $\Phi(x, t) > 0$ 表示实体区域, $\Phi(x, t) = 0$ 表示边界, $\Phi(x, t) < 0$ 表示孔洞。如图 4 所示。

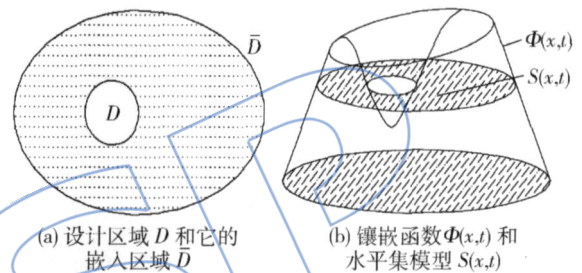


图 4 水平集法模型

Fig. 4 Model of level set method

本文模拟有限元四节点平面单元的形函数 N_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 将镶嵌函数 $\Phi(x, t)$ 简化为一个二维插值函数

$$\Phi(x, y) = N_i \Phi_i \quad (18)$$

其中 $i = 1, 2, 3, 4, e = 1, \dots, N_x \cdot N_y$ 。

这样就实现了使用四个节点在 z 方向的位移来描述单元的细观结构。对进行拓扑优化的结构进行单元划分就实现了用有限个节点在 z 方向的位移来描述多相材料细观结构。

3 多相材料的优化设计

一种广义的多相材料代表性体元的初始细观结构如图 5 所示, 其中的深色的部分代表实体材料, 浅色的部分代表孔洞。为了使具有这种细观结构的多孔材料有特殊的力学性能——拉胀性能, 即具有负泊松比的特性, 下面采用本文提出的方法进行优化。利用 HFGMC 模型将这样的细观结构与宏观力学性能联系起来, 采用不同的数字阵列来描述其材料的有无, 利用水平集法将这个多相材料细观结构拓扑优化问题转化为形状优化问题。

3.1 优化的标准化

假定细观结构中有限点的初始位移值, 通过

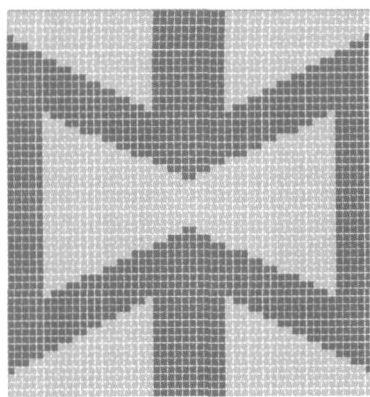


图 5 多相材料的细观结构

Fig. 5 Microstructure of multiphase material

水平集法的镶嵌函数可以描述多相材料的细观结构, HFGMC 模型能将其与宏观力学性能如泊松比联系起来, 这样就可以建立有限点位移与泊松比之间的函数关系.

认为图 5 所示的细观结构具有对称性, 取 1/4 如图 6(a) 所示, 利用水平集法来描述这种细观结构. 对其进行网格划分如图 6(b) 所示, 将其划分成 9 个单元, 共有 16 个节点.

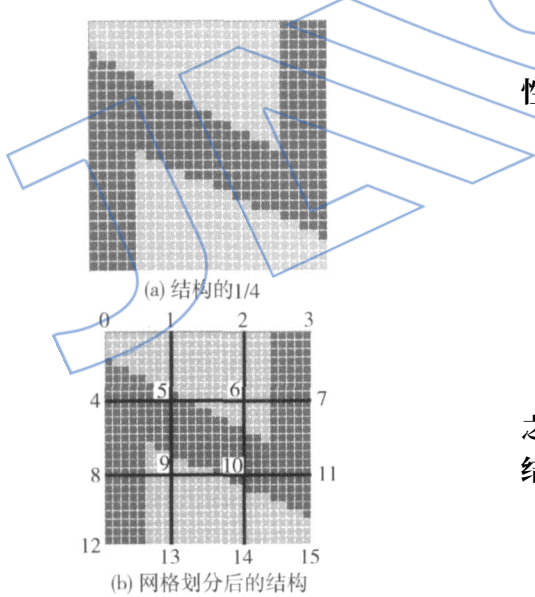


图 6 结构的 1/4 及网格划分

Fig. 6 Quarter of microstructure and mesh

下面就是要建立这 16 个节点与泊松比之间的关系. 取其中的一个单元如图 7(a) 所示, 假设 4 个节点在 z 方向的位移 w , 根据式(18) 就可以得到这个单元的镶嵌函数 $\Phi(x, y)$, 如图 7(b) 所示.

假设位移 $[w_1, w_2, w_3, w_4] = [0, -1, 0, 1]$, 其镶嵌函数 $\Phi(x, y) > 0$ 表示有材料, 对应图中的区域 134, $\Phi(x, y) < 0$ 表示没有材料, 对应图中的区域 123. 对这个单元再进行网格划分, 取其单元

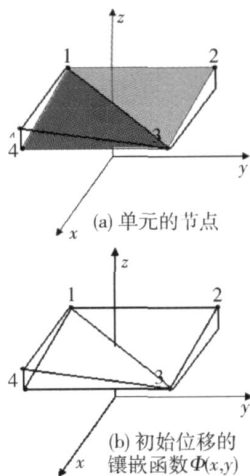


图 7 单元的节点及镶嵌函数

Fig. 7 Nodes of element and inlaid function

中心点 x, y 的坐标代入镶嵌函数 $\Phi(x, y)$ 就可以判断该单元是否有材料. 这样只要给出图 6(b) 中 16 个点在 z 方向的位移 w , 就可以得到类似于图 5 的细观结构, 进而得到多相材料的宏观力学性能泊松比, 即目标函数. 其数学表达式为

$$\mu_{yx} = \mu_{yx}(w_0, w_1, \dots, w_{15}) \quad (19)$$

要使具有这种细观结构的多相材料具有拉胀性能, 要限制这些位移值的正负. 数学表达式为

$$\begin{aligned} w_i &< 0 (i = 0, 1, 2, 6, 9, 13, 14, 15) \\ w_j &> 0 (j = 3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 12) \end{aligned} \quad (20)$$

将目标函数和约束函数转化为优化的标准形式

$$\begin{aligned} \min \quad & \mu_{yx} = \mu_{yx}(w_0, w_1, \dots, w_{15}) \\ \text{S. T. } & w_i < 0 (i = 0, 1, 2, 6, 9, 13, 14, 15) \\ & w_j > 0 (j = 3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 12) \end{aligned} \quad (21)$$

这样就建立了 16 个位移值 w_i 和泊松比 μ_{yx} 之间的函数关系 (如图 8 所示), 将多相材料细观结构的拓扑优化问题转换成形状优化问题.

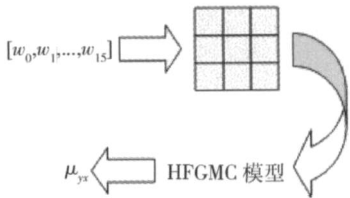


图 8 多相材料细观结构的建模过程

Fig. 8 Modeling process of microstructure of multiphase material

3.2 算例分析

根据上面建立的目标函数, 采用复合形法^[19]进行优化设计. 首先要确定初始复合形的顶点个数, 那么根据 $n + 1 \leq k \leq 2n$ (n 为设计变量个数, k

为复合形的顶点数),文中的设计变量个数为 16,取初始复合形顶点数为 20.那么建立初始的复合形,要给出描述多相材料细观结构的 20 组初始位移,其中一组的初始位移值 $[w_0, w_1, \cdots, w_{15}] = [-16, -28, -9, -16, 15, 20, -0.15, 1, 1, -0.5, 20, 15, -16, -9, -28, -16]$,其对应的细观结构如图 9 所示.

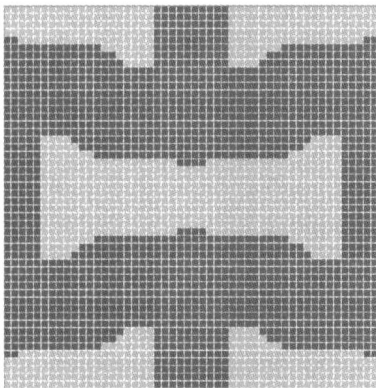


图 9 初始点的细观结构
Fig.9 Microstructure of initial point

使用复合形法进行优化,可以获得优化后的 μ_{yx} 值,即具有拉胀特性的多相材料的细观结构.

本文采用了三个方案,第一和第二个方案是分别给出初始的复合形的顶点位移值,第三个方案是根据约束函数(式(20)),产生随机的初始位移值来构成初始复合形.

材料的刚度和泊松比分别为: $E_1 = 200 \text{ GPa}$, $\mu = 0.3$,孔洞的刚度应该为零,但刚度为零时 HFGMC 模型无法计算,因而取孔洞的刚度和泊松比分别为: $E_2 = 1 \text{ GPa}$, $\mu = 0.35$. 这三个方案的优化结果如表 1 所示.

表 1 复合形法的优化结果		
Table 1 Optimized result of complex method		
编号	类 型	泊松比 μ_{xy}
1	给定初始复合形一	- 0.534 774
2	给定初始复合形二	- 0.519 712
3	产生初始复合形	- 0.492 506

这三个方案优化所得的细观结构分别如图 10 所示(其中深色表示实体材料,浅色表示孔洞).

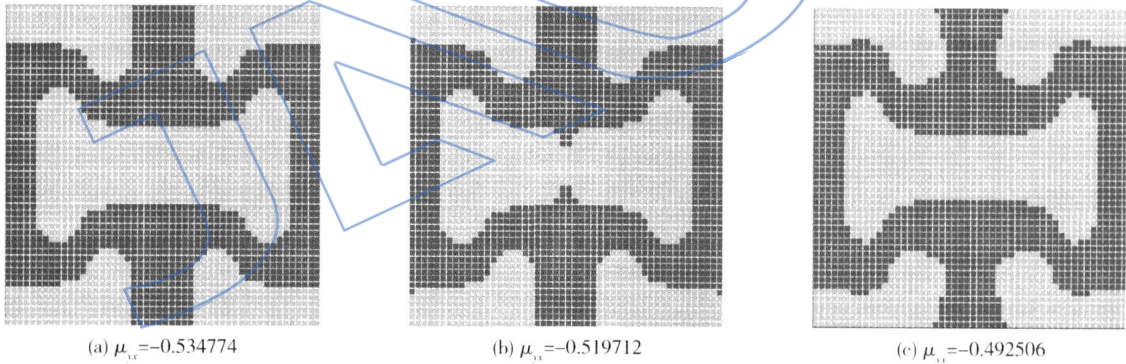


图 10 多相材料优化所得到的细观结构
Fig. 10 Optimized microstructure of multiphase material

下面采用细观有限元法对优化获得的多相材料的细观进行分析.由于结构的对称性,同样选取结构(左上方)的 1/4 建模,如图 11 所示,边界条件为:边 34 在 y 方向的位移为零,边 24 在 x 方向的位移为零,边 12 在 y 方向的位移进行耦合,对边 13 施加 x 方向的位移 $u_x = -0.01$.

三种优化后的细观结构在细观有限元法下的横向受拉时的变形情况分别如图 12 所示,其中深色的线条表示变形后的边界,而浅色的线条表示变形前的边界,可见具有明显的拉胀性能.

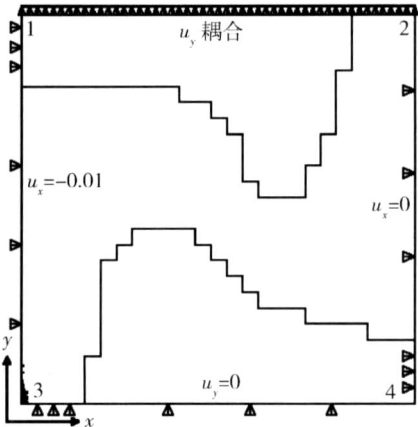


图 11 细观有限元法的模型
Fig. 11 Model of micro-finite-element method

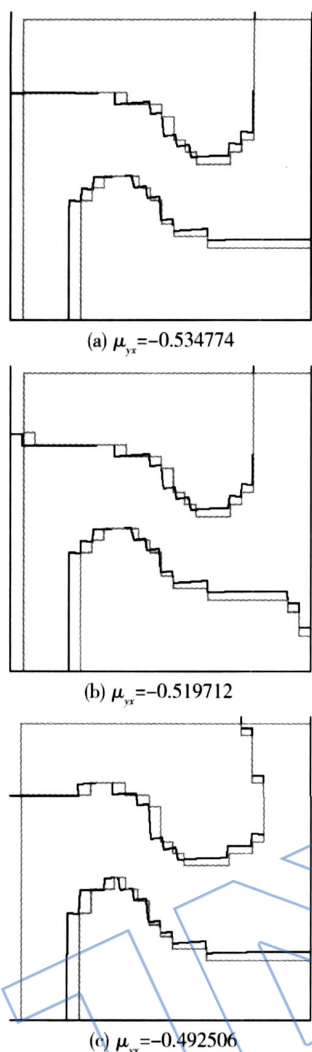


图12 细观结构在细观力学有限元法下的变形情况

Fig. 12 Deform of microstructure by micro FEM

4 结 论

本文利用高精度通用单胞模型和水平集法,将多相材料细观结构的拓扑优化问题转化为连续变量的形状优化问题,实现了多相材料的细观结构优化。

以一种多相材料细观结构为例,采用复合形法进行优化,获得了具有负泊松比的特性,优化结果表明,所提出的方法可以有效地进行多相材料细观结构拓扑优化设计。

参考文献:

- [1] Sigmund O. Materials with prescribed constitutive parameters: An inverse homogenization problem [J]. International Journal of Solids and Structures, 1994, 31: 2313-2329.
- [2] Lakes R. Design considerations for materials with negative poisson's ration[J]. Journal of Mechanical Design, 1993, 115: 696-700.
- [3] Sigmund O, Torquato S. Composites with extremal thermal expansion coefficients [J]. Applied Physics Letters, 1996, 69(21): 3203-3205.
- [4] Yi Y M, Park S H. Design of microstructures of viscoelastic composites for optimal damping characteristics[J]. International Journal of Solids and Structures, 2000, 37: 4791-4810.
- [5] Sigmund O. On the design of 1-3 piezocomposites using topology optimization [J]. J. Mater. Res. 1998, 13 (4): 1038-1048.
- [6] Hassani B, Hinton E. Homogenization and structural topology optimization: Theory, Practice and Software [M]. London: Springer, 1999.
- [7] Bendsoe M P, Sigmund O. Topology optimization: Theory, method, and applications [M]. New York: Springer, 2003.
- [8] 孙志刚. 复合材料高精度宏细观统一本构模型及应用研究 [D]. 南京: 南京航空航天大学, 2005.
SUN Zhigang. Research on a high-fidelity unified macro- and micro-mechanics constitutive model and its application for composites [D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2005. (in Chinese)
- [9] 孙靖民. 机械设计优化 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2003.