

УДК 539.3

Оптимизация многокомпонентных дисперсно-армированных композитов на основе сплайн-аппроксимации

Димитриенко Ю. И.^{1,*}, Дроголюб А. Н.¹,
Губарева Е. А.¹

[*dimit.bmstu@gmail.com](mailto:dimit.bmstu@gmail.com)

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

В работе предложен алгоритм решения задачи оптимального проектирования многокомпонентных дисперсно-армированных композиционных материалов, свойства которых определяются концентрациями наполнителей и не зависят от их формы. Сформулирована задача условной оптимизации композита с ограничениями на его эффективные характеристики - модуль упругости, прочности при растяжении и сжатии и коэффициент теплопроводности при минимизации плотности композита. Расчет эффективных характеристик композита осуществляется с помощью конечно-элементного решения вспомогательных локальных задач теории упругости и теплопроводности, возникающих при использовании метода асимптотического осреднения. Предложенный алгоритм решения задачи оптимизации состоит из следующих основных этапов: а) Построение множества решений прямой задачи вычисления эффективных характеристик. б) Построение зависимостей эффективных характеристик от концентраций наполнителей с помощью аппроксимирующих функций, в качестве которых предложено использовать thin plate spline со сглаживанием. в) Построение множества точек, удовлетворяющих ограничениям и построение границы множества точек, удовлетворяющих ограничениям, в результате которых получен контур, который может быть параметризован. г) Определение глобального минимума плотности на контуре с помощью преобразования. Приведен численный пример решения задачи оптимизации для дисперсно-армированного композита с двумя типами наполнителей в виде полых микросфер: стеклянных и фенольных. Показано, что предложенный алгоритм позволяет достаточно эффективно находить оптимальные концентрации наполнителей.

Ключевые слова: оптимизация, оптимальное проектирование, дисперсно-армированные композиты, метод асимптотического осреднения, метод конечного элемента, локальные задачи, ячейка периодичности, сплайн аппроксимации, пси-преобразование, модули упругости, прочность, теплопроводность

Введение

Методы численного моделирования широко используются при проектировании композиционных материалов с заранее заданными свойствами. Эти методы позволяют

находить оптимальные состав и микроструктуру композитов с помощью решения математических задач оптимизации, существенно сокращая число необходимых переборов различных вариантов составов материалов. Эти задачи оптимизации представляют собой разновидность обратных задач механики, для их численного решения используются итерационные методы решения прямых задач расчета эффективных характеристик композитов по характеристикам структурных компонентов этих материалов. Эти методы численного решения задач расчета свойств композиционных материалов со сложными микроструктурами активно развиваются на основе метода асимптотического осреднения [1] и методов конечно-элементного решения локальных задач на ячейках периодичности [2,3].

В настоящее время достаточно хорошо разработаны методы оптимизации структуры слоистых композитов [4-6], предложены подходы на основе генетических алгоритмов [7-10] и статистических методов [11], рассмотрены подходы к глобальной оптимизации [12]. Постановка обратной задачи поиска структуры композиционного материала с заданными свойствами, на основе метода асимптотического осреднения, была рассмотрена в работе [4] для материала с одним наполнителем.

В данной работе предлагается общий подход к решению задачи определения оптимальной структуры композита для материала при наличии ограничений для случая большого числа различных наполнителей композита.

1. Постановка задачи

Композиционный материал рассматривается как периодическая по трем направлениям структура, состоящая из одинаковых ячеек периодичности. Каждая ячейка, в свою очередь, состоит из матрицы и нескольких различных наполнителей $\alpha = \overline{1, N-1}$, матрица имеет номер $\alpha = N$. Рассмотрим случай композитов, у которых наполнители имеют шарообразную форму - сплошные шары различных радиусов или полые шары (микросферы) имеющие толщину h оболочки микросферы. Полагаем, что ячейка периодичности композита обладает симметрией относительно всех трех координатных плоскостей и относительно поворотов на угол $\pi/2$ относительно всех осей координат. Такой композит представляет собой материал с кубическим классом симметрии [13] и обладает 3 эффективными упругими константами - модулем упругости, - коэффициентом Пуассона и модулем сдвига, а также одним коэффициентом теплопроводности $\bar{\lambda}$. Задача оптимизации структуры композита ставится как задача определения такой структуры ячейки периодичности, которая обеспечивает минимальную плотность композита, при ограничениях на эффективные характеристики материала: модуль Юнга $\bar{E}$, теплопроводность $\bar{\lambda}$, пределы прочности при растяжении и сжатии $\bar{\sigma}_T, \bar{\sigma}_C$. Эти ограничения имеют вид следующих неравенств:

$$\hat{E} \leq \bar{E} \leq \tilde{E}, \quad \bar{\lambda} \leq \hat{\lambda}, \quad \bar{\sigma}_T \geq \hat{\sigma}_T, \quad \bar{\sigma}_C \geq \hat{\sigma}_C, \quad (1)$$

Тогда задача оптимизации композита сводится к минимизации функции плотности композита $\bar{\rho}$

$$\bar{\rho}(\varphi_1, \dots, \varphi_N) \rightarrow \min \quad (2)$$

$$\bar{\rho}(\varphi_1, \dots, \varphi_N) = \sum_{\alpha=1}^N \rho_{\alpha} \varphi_{\alpha}, \quad (3)$$

плотность где $\rho_{\alpha}, \varphi_{\alpha}$ – плотность и объемная концентрация компонента композита с номером α .

Далее рассматриваются композиционные материалы, эффективные характеристики которых зависят только от концентраций компонентов и не зависят от их формы. Поэтому структуру материала будем отождествлять с N -мерным вектором $\varphi = (\varphi_1, \dots, \varphi_N)$. К таким материалам, в частности, относятся дисперсно-армированные композиты со сплошными и полыми сферическими частицами наполнителей и материалы с цилиндрическими волокнами наполнителей.

2. Вычисление эффективных характеристик композита

Для вычисления эффективных характеристик композита - $\bar{E}(\varphi_1 \dots \varphi_N)$, $\bar{\lambda}(\varphi_1 \dots \varphi_N)$, $\bar{\sigma}_T(\varphi_1, \dots, \varphi_N)$, $\bar{\sigma}_C(\varphi_1 \dots \varphi_N)$ применим метод асимптотического осреднения, согласно которому решаются локальные задачи теории упругости и теории теплопроводности. Локальные задачи теории упругости L_{pq} имеют вид [2]

$$\begin{cases} \sigma_{ij(pq)/j}^{\alpha} = 0 \text{ в } V_{\alpha}, \\ \sigma_{ij(pq)}^{\alpha} = C_{ijkl}^{\alpha} \varepsilon_{kl(pq)}^{\alpha} \text{ в } V_{\alpha} \cup \Sigma_{\alpha N} \cup \Sigma_s \cup \Sigma'_s \\ \varepsilon_{ij(pq)}^{\alpha} = \frac{1}{2} (U_{i(pq)/j}^{\alpha} + U_{j(pq)/i}^{\alpha}) \text{ в } V_{\alpha} \cup \Sigma_{\alpha N} \cup \Sigma_s \cup \Sigma'_s \\ U_{i(pq)}^{\alpha} = U_{i(pq)}^N \text{ на } \Sigma_{\alpha N} \\ (\sigma_{ij(pq)}^{\alpha} - \sigma_{ij(pq)}^N) n_j = 0 \text{ на } \Sigma_{\alpha N}, \quad \alpha = \overline{1, N}, \end{cases} \quad (4)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} U_{i(pq)}^{\alpha} = \frac{1}{2} \varepsilon_{pq} \delta_{ip}, \quad U_{j(pq)/i}^{\alpha} = 0, \quad U_{k(pq)/i}^{\alpha} = 0, \quad \xi \in \Sigma'_i, \quad i \neq j \neq k \neq i \text{ при } p = q, \\ U_{i(pq)}^{\alpha} = \frac{1}{4} \varepsilon_{pq} \delta_{ip}, \quad U_{j(pq)/j}^{\alpha} = 0, \quad U_{k(pq)}^{\alpha} = 0, \quad \xi \in \Sigma'_j, \quad \text{при } i, j = \{p, q\}, p \neq q, \\ U_{i(pq)}^{\alpha} = \frac{1}{4} \varepsilon_{pq} \delta_{ip}, \quad U_{j(pq)/k}^{\alpha} = 0, \quad U_{k(pq)}^{\alpha} = 0, \quad \xi \in \Sigma'_k, \quad i \neq j \neq k \neq i \text{ при } i, j \neq \{p, q\}, p \neq q \end{cases} \quad (5)$$

Здесь $U_{i(pq)}^{\alpha}$, $\sigma_{ij(pq)}^{\alpha}$, $\varepsilon_{ij(pq)}^{\alpha}$ – перемещения, напряжения (микронапряжения) и деформации в компонентах α композита, занимающих объемы V_{α} , $\Sigma_{\alpha N}$ – поверхности контакта компонентов композита α и N , N – связующий компонент композита (матрица); Σ_s – координатные плоскости ($\Sigma_s = \{\xi_s : \xi_s = 0\}$); $\Sigma'_s = \{\xi_s : \xi_s = 1/2\}$ – торцевые

поверхности ячейки периодичности, имеющей форму единичного куба, $s=1,2,3$; ξ_s – безразмерные координаты в пределах единичного куба (локальные координаты), ξ – точка на поверхности ячейки периодичности, $\bar{\varepsilon}_{pq}$ – заданные средние деформации (макродеформации) композита.

Локальные задачи теплопроводности L_p имеют вид

$$\begin{cases} q_{i(p)/i} = 0 \text{ в } V_\alpha, \\ q_{i(p)} = -\lambda_{ij}^\alpha g_{j(p)} \text{ в } V_\alpha, \\ g_{i(p)} = \theta_{(p)/i}^\alpha \text{ в } V_\alpha, \\ \theta_{(p)}^\alpha = \theta_{(p)}^N, \quad (q_{i(p)}^\alpha - q_{i(p)}^N) n_i = 0 \text{ на } \Sigma_{\alpha N}, \quad \alpha = \overline{1, N}, \quad p = \overline{1, 3}, \end{cases} \quad (6)$$

с граничными условиями

$$\begin{cases} \theta = \frac{1}{2} \bar{g}_p \text{ на } \Sigma'_p, \quad \theta_{/p} = 0 \text{ на } \Sigma_p, \\ \theta_{/p} = 0 \text{ на } \Sigma'_i, \Sigma_i, \quad p = \overline{1, 3}, \quad i = \overline{1, 3} \end{cases} \quad (7)$$

Здесь $q_{i(p)}$ – компоненты вектора теплового потока, $g_{j(p)}$ – компоненты вектора градиента температуры, $\theta_{(p)}^\alpha$ – температуры в компонентах композита, $\bar{g}_p$ – заданные компоненты осредненного вектора градиента температуры.

После решения локальных задач упругие и тепловые эффективные характеристики – эффективные модули упругости $\bar{C}_{ijpq}$ и эффективные коэффициенты теплопроводности $\bar{\lambda}_{pq}$ определяются интегрированием полученных в результате физических полей по формулам [2]

$$\bar{C}_{ijpq} = \frac{1}{\varepsilon_{pq}} \sum_{\alpha=1}^N \int_{V_\alpha} \sigma_{ij(pq)}^\alpha dV, \quad \bar{\lambda}_{pq} = -\frac{1}{g_q} \sum_{\alpha=1}^N \int_{V_\alpha} q_{p(q)}^\alpha dV. \quad (8)$$

Далее вычисляется тензор эффективных податливостей композита $\bar{P}_{ijpq} = (\bar{C}_{ijpq})^{-1}$, по компонентам которого находится эффективный модуль упругости: $\bar{E} = 1 / \bar{P}_{1111}$. Для вычисления пределов прочности $\bar{\sigma}_T$ и $\bar{\sigma}_C$ композита была использована методика, разработанная в [4].

Решение локальных задач (4), (5) и (6), (7) осуществляется на основе метода конечных элементов [3].

3. Преобразование задачи условной минимизации

Функция плотности (3) линейна, вследствие чего её минимум должен достигаться на границе области ограничений. Это приводит к идее явного построения границы области ограничений с последующим решением задачи глобальной минимизации функции (3) по этой границе. При этом граница области ограничений не обязана быть односвязной. Область удовлетворения ограничений обозначим G , а его границу этой области C .

Для проведения глобальной минимизации вдоль границы области ограничений предпочтительно иметь эту границу заданной в параметрическом виде. Алгоритм этой параметризации выберем следующим:

- 1) построение опорных точек границы;
- 2) интерполяция по опорным точкам с помощью функции некоторого выбранного вида;
- 3) параметризация полученной границы.

Данный подход является общим и может быть использован в случае произвольной размерности исходной задачи минимизации (числа наполнителей). Опишем его более подробно.

Построение опорных точек границы. Выберем наполнитель, имеющий наименьшую плотность. Пусть он имеет номер i , т.е. $\rho_i = \min_{\alpha=1,N} \rho_\alpha$. Рассмотрим точку в N -мерном пространстве структур композита $\varphi^0: \varphi_k^0 = \delta_{ik}$, что соответствует материалу, состоящему только из наполнителя с номером i . Если материал со структурой φ^0 удовлетворяет ограничениям, то он автоматически является точным решением задачи, поскольку материал для любой другой точки φ гарантированно будет иметь большую плотность. Пусть φ^0 не удовлетворяет ограничениям.

Выпустим пучок лучей из точки φ^0 . Каждый луч будем обозначать набором его независимых направляющих косинусов ℓ . Все концентрации компонент лежат в пределах $[0,1]$, поэтому все направляющие косинусы неотрицательны и независимыми из них будут только $N-1$, т.е. $\ell = (\ell_1, \dots, \ell_{N-1})$. При этом вдоль каждого луча ℓ плотность композита возрастает. На каждом луче введем параметр длины l и вспомогательную функцию

$$f(l) = \begin{cases} -1, & \varphi(l) \text{ не удовлетворяет ограничениям} \\ 1, & \varphi(l) \text{ удовлетворяет ограничениям} \end{cases} \quad (9)$$

и определим

$$l^*: f(l^* + \varepsilon) \cdot f(l^* - \varepsilon) = -1 \text{ или } \exists k: \varphi_k(l^*) = 1, \quad (10)$$

где ε – малое число, задающее требуемую точность определения точек границы множества структур, удовлетворяющих ограничениям. Второе условие в (10) требуется на случай, если на данном луче нет ни одной точки, удовлетворяющей ограничениям. Для конкретного луча l^* определяется методом, аналогичным поразрядному поиску. Множество точек $\varphi_i^* = \varphi^*(\ell_i) = \varphi(\ell_i, l_i^*)$ для всех выпущенных лучей будем называть множеством опорных точек границы.

Интерполяция и параметризация границы. Для построения аналитической функции, описывающей границу области удовлетворения ограничений, т.е. интерполирующей зависимость $\varphi^*(\ell)$, необходимо воспользоваться многомерной интерполяцией. Для случая матрицы с наполнителями двух типов выберем thin-plate spline [15], который строится по следующей схеме [16]. Пусть имеется $2n$ точек в R^2 :

$P_1(x_1, y_1), \dots, P_n(x_n, y_n), P'_1(x_1, y_1), \dots, P'_n(x_n, y_n)$. Построим функцию f , удовлетворяющую условию

$$f(P_i) = P'_i, i = \overline{1, n}. \quad (11)$$

Введем скалярную функцию $U(r) = r^2 \ln r$, доопределенную по непрерывности нулем при $r = 0$. Обозначим $r_{ij} = |P_i - P_j|$ и построим матрицы K , Y и P :

$$K = \begin{pmatrix} 0 & U(r_{12}) & \dots & U(r_{1n}) \\ U(r_{21}) & 0 & \dots & U(r_{2n}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ U(r_{n1}) & U(r_{n2}) & \dots & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} x'_1 & x'_2 & \dots & x'_n & 0 & 0 & 0 \\ y'_1 & y'_2 & \dots & y'_n & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T, P = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & y_n \end{pmatrix}.$$

На их основе сформируем блочную матрицу

$$L = \left(\begin{array}{c|c} K & P \\ \hline P^T & 0 \end{array} \right),$$

и запишем уравнение

$$L \cdot \begin{pmatrix} V & a_1 & a_x & a_y \\ W & b_1 & b_x & b_y \end{pmatrix}^T = Y. \quad (12)$$

Решая уравнение (12), получим итоговую функцию

$$f^*(x, y) = \begin{pmatrix} a_1 + a_x x + a_y y + \sum_{i=1}^n v_i U(|P_i - (x, y)|) \\ b_1 + b_x x + b_y y + \sum_{i=1}^n w_i U(|P_i - (x, y)|) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

которая удовлетворяет задаче (11) и при этом минимизирует функционал

$$I(f) = \int_{\mathbb{R}^2} \left(\left(\frac{\partial^2 f}{\partial \ell_1^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \ell_1 \partial \ell_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \ell_2^2} \right)^2 \right) d\ell_1 d\ell_2. \quad (14)$$

Полученная функция f^* , представляет собой аналитическую зависимость $\varphi^*(\ell)$, т.е. получен аналитический вид границы области удовлетворения ограничений G . Это позволяет построить функцию плотности на множестве S . При этом множество S параметризуется $N-1$ направляющим косинусом. Таким образом, для случая материала с двумя наполнителями $\varphi^*(\ell)$ будет являться функцией одной переменной.

Данные опорных точек не могут считаться свободными от шума, поэтому для повышения устойчивости интерполяционная задача (5) должна быть заменена на регуляризованную [17]. При использовании большого количества опорных точек задаваемый уравнением (6) классический способ построения сплайна, предполагающий обращение матрицы L , может быть заменен на аппроксимированный по методу [18].

Минимум функции $\bar{\rho}$ лежит на S , поэтому решение задачи сводится к поиску глобального безусловного минимума $\bar{\rho}$ на S . В случае небольшого (два-три) количества наполнителей для этого эффективен метод пси-преобразования [19].

4. Численный эксперимент

Для численного моделирования был выбран дисперсно-армированный композиционный материал [20, 21] с двумя различными наполнителями в виде полых микросфер с толщиной оболочки в 10% от радиуса. Управляемыми параметрами являются концентрации наполнителей (отражающиеся на относительных радиусах микросфер в ЯП). Ограничения накладываются на прочность (не ниже заданного минимума) и коэффициент теплопроводности (не выше заданного максимума).

Микросферы наполнителя первого типа – стеклянные с характеристиками [21]: $\rho^1=2600 \text{ кг/м}^3$, $E^1=70 \text{ ГПа}$, $\nu^1=0,2$, $\lambda^1=0,7 \text{ Вт/(м·К)}$, $\sigma_T^1 = 0,5 \text{ ГПа}$, $\sigma_C^1 = 0,6 \text{ ГПа}$, $\sigma_S^1 = 0,4 \text{ ГПа}$.

Микросферы наполнителя второго типа – фенольные с характеристиками [21]: $\rho^2=1007 \text{ кг/м}^3$, $E^2=2 \text{ ГПа}$, $\nu^2=0,35$, $\lambda^2=0,36 \text{ Вт/(м·К)}$, $\sigma_T^2 = 0,035 \text{ ГПа}$, $\sigma_C^2 = 0,043 \text{ ГПа}$, $\sigma_S^2 = 0,027 \text{ ГПа}$.

Матрица выбрана кремнийорганической с характеристиками [21]: $\rho^3=1100 \text{ кг/м}^3$, $E^3=2 \text{ ГПа}$, $\nu^3=0,35$, $\lambda^3=0,2 \text{ Вт/(м·К)}$, $\sigma_T^3 = 0,01 \text{ ГПа}$, $\sigma_C^3 = 0,01 \text{ ГПа}$, $\sigma_S^3 = 0,005 \text{ ГПа}$.

Ограничения выбраны следующими:

$$\hat{\sigma}_T = 5,5 \text{ МПа}, \quad \hat{\sigma}_C = 10 \text{ МПа}, \quad \hat{\lambda} = 0,28 \text{ Вт/(м·К)}. \quad (15)$$

Область удовлетворения ограничений G (15) строилась путем численного решения задачи определения эффективных характеристик на основе метода асимптотического осреднения (рисунок 1).

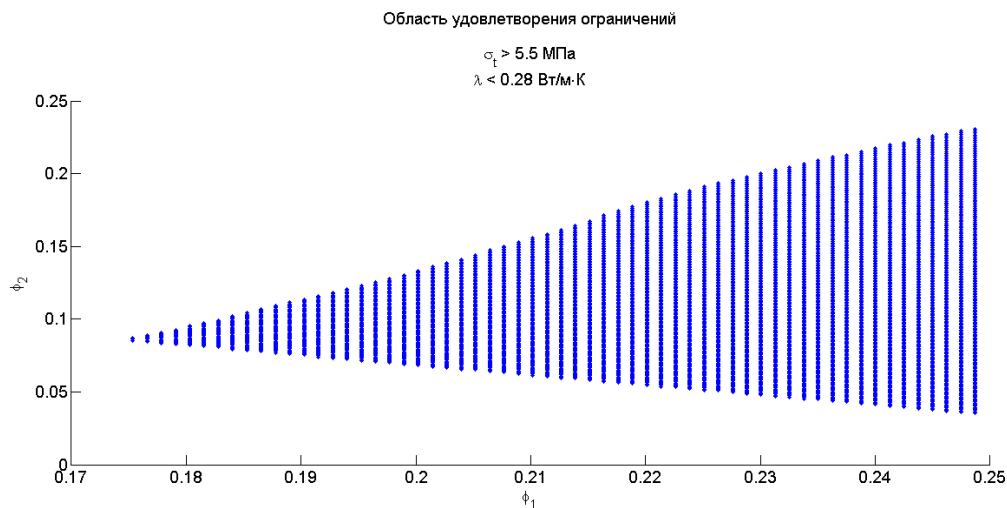


Рисунок 1 – Множество точек, удовлетворяющих ограничениям (15) (заштрихована)

Далее согласно описанному выше методу выделялась граница C области G (рисунок 2).

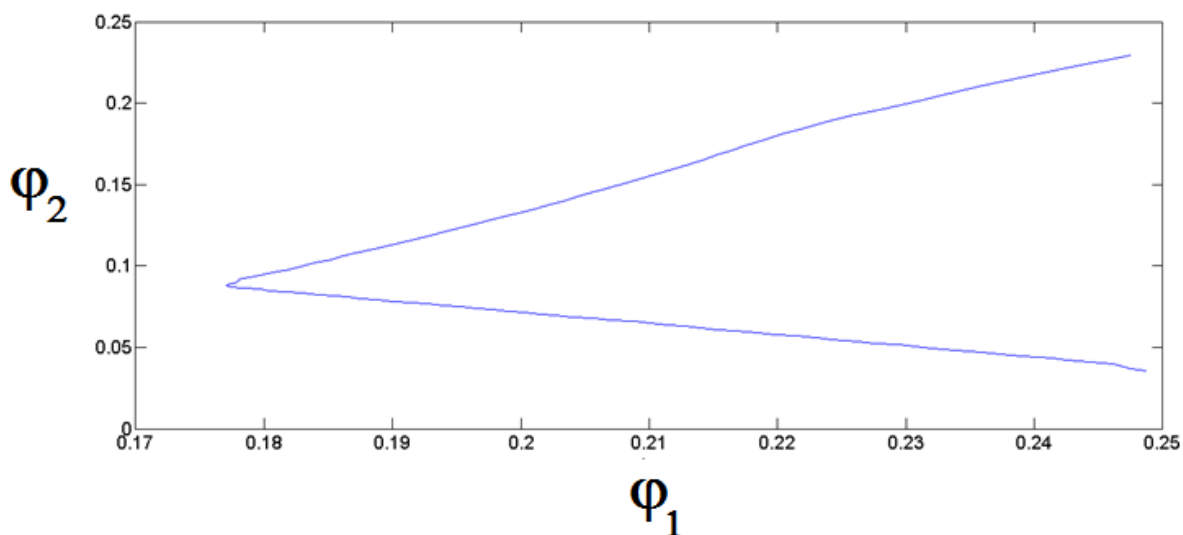


Рисунок 2 – Граница множества точек, удовлетворяющих ограничениям (15)

Вдоль контура C вводится параметр $t \in [0;1]$. Зависимость концентраций фаз от параметра контура интерполируется с помощью кубического сплайна. На рисунке 3 представлены зависимости концентраций фаз наполнителей от t .

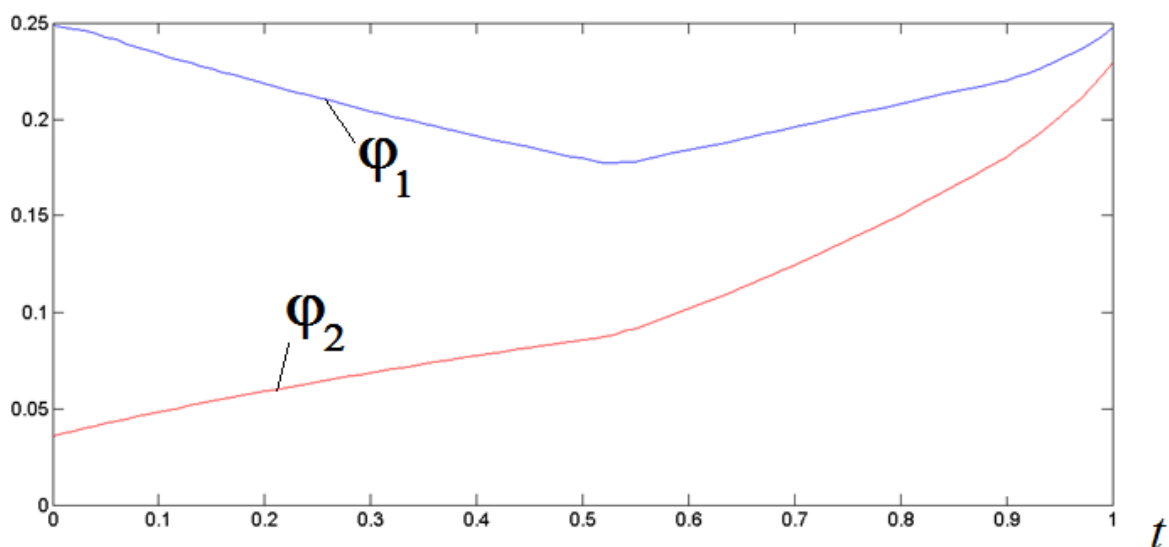


Рисунок 3 – Зависимость концентраций от параметра контура t

Далее для иллюстрации на основе thin plate spline (TPS) были получены зависимости эффективного предела прочности на растяжение и эффективного коэффициента теплопроводности на контуре C (рисунки 4, 5).

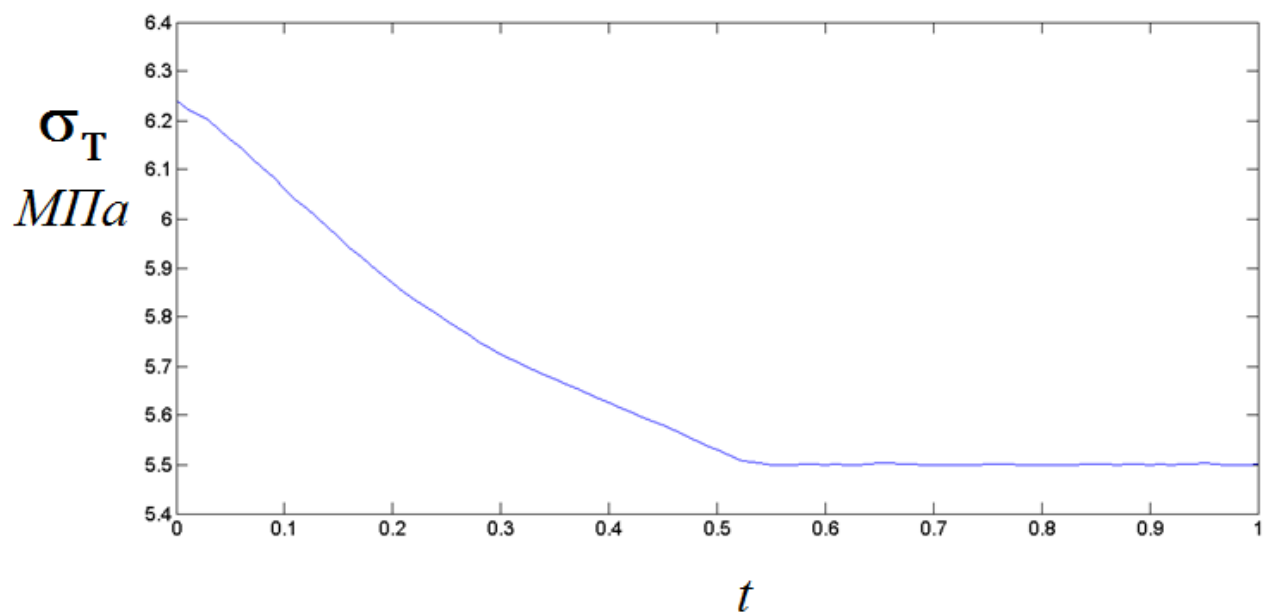


Рисунок 4 – Значение эффективного предела прочности на растяжение на контуре С, полученное на основе TPS.

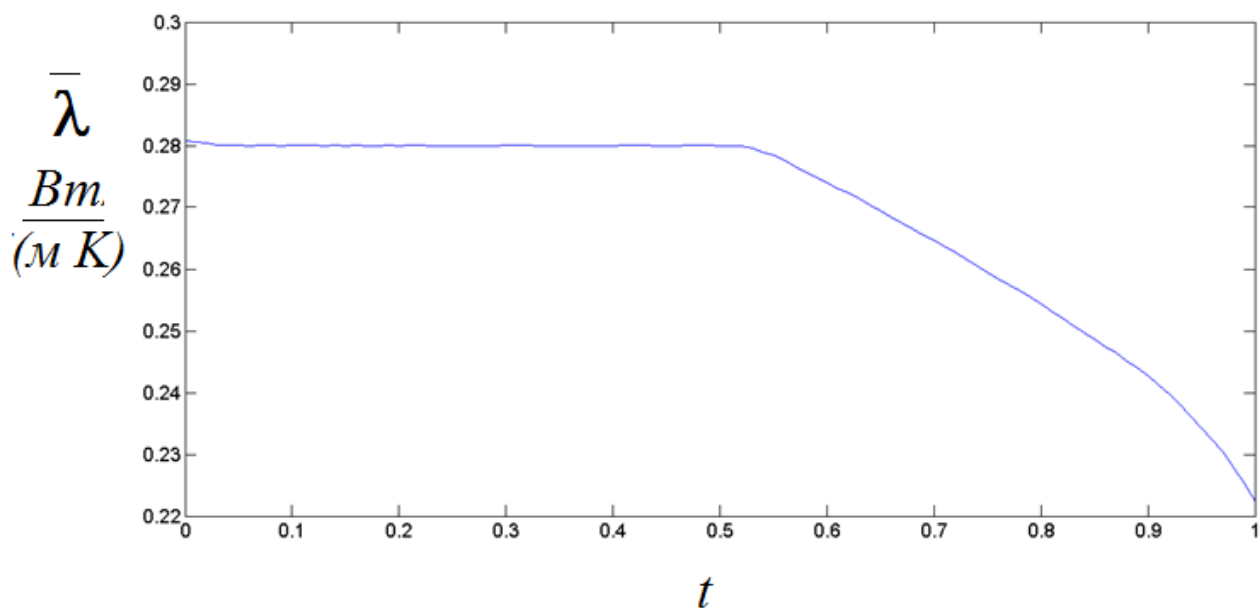


Рисунок 5 – Значение эффективного коэффициента теплопроводности на контуре С, полученное на основе TPS.

На рисунках 6, 7 представлены зависимости эффективной плотности на контуре С от параметра контура t и от концентраций фаз наполнителей.

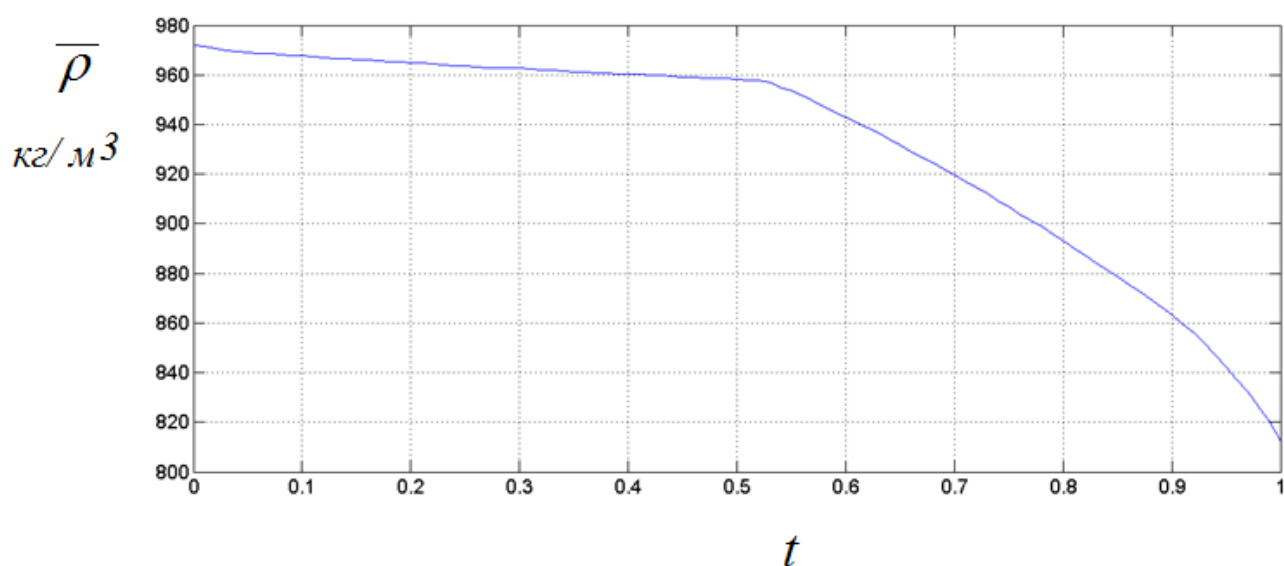


Рисунок 6 – Зависимость плотности композита от параметра контура t

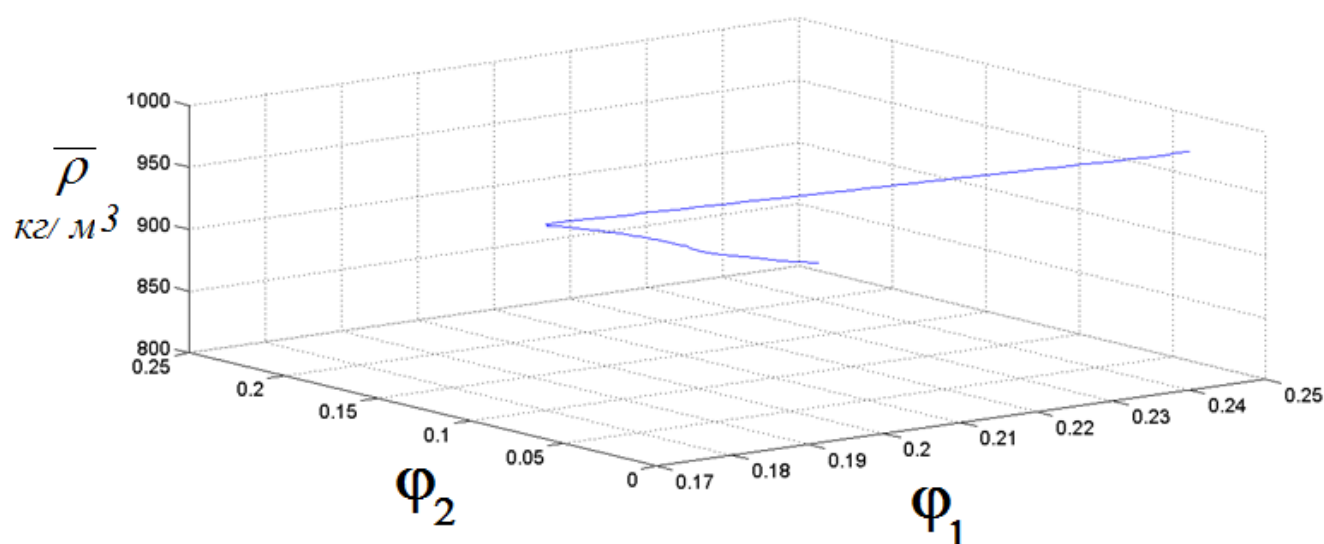


Рисунок 7 – Зависимость плотности от концентраций наполнителей на контуре C

Отметим, что для выбранных материалов матрицы и наполнителей оптимальное значение плотности достигается не во внутренней точке C , а на его краю. По всей видимости, это связано с наличием больших полостей в микросферах. Из-за них для облегчения композита выгодно брать как можно большие допустимые концентрации наполнителей. Однако при плотностях наполнителей, превышающих плотность матрицы в несколько раз, минимум будет достигаться в некоторой внутренней точке. Пример такой ситуации приведен на рисунке 8.

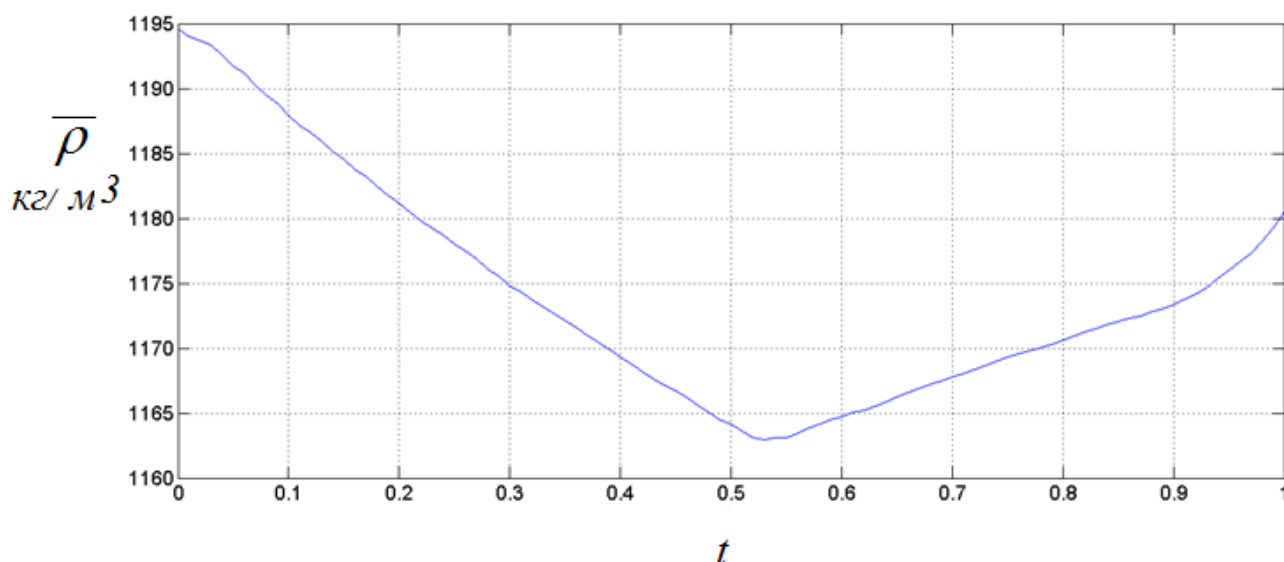


Рисунок 8 – Зависимость плотности композита от параметра контура С для «тяжелых» наполнителей

Методом пси-преобразования было получено значение глобального минимума плотности $\rho^{onm}=812,4 \text{ кг/м}^3$. Ему соответствуют оптимальные значения концентраций фаз наполнителей $\varphi_1^{onm} = 0,248$, $\varphi_2^{onm} = 0,229$.

На рисунке 9 показан вид ячейки периодичности для оптимальных концентраций наполнителей. Для иллюстрации также приведено решение для поля напряжения σ_{11} в локальной задаче упругости L_{11} (рисунок 10) и поля температуры в локальной задаче теплопроводности L_1 (рисунок 11). Количество конечных элементов – 453 тыс.

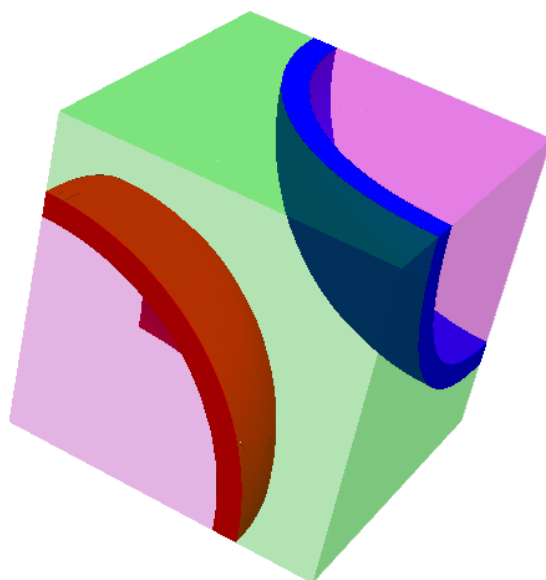


Рисунок 9 – Вид ячейки периодичности для оптимальных концентраций наполнителей

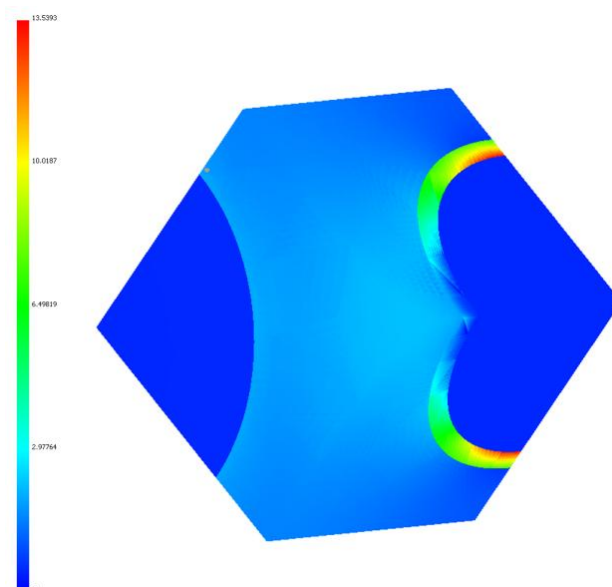


Рисунок 10 – Поле напряжения σ_{11} в локальной задаче упругости L_{11}

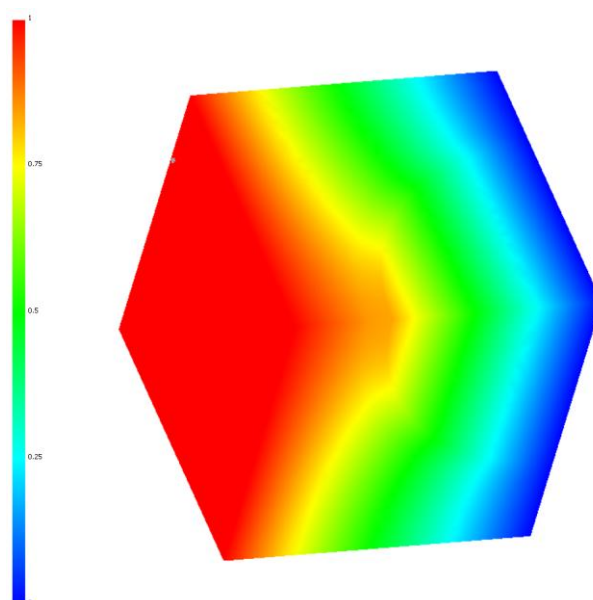


Рисунок 11 – Поле температуры в локальной задаче теплопроводности L_1

Заключение

В работе предложен подход, позволяющий эффективно решать задачу оптимального проектирования многокомпонентных дисперсно-армированных композиционных материалов, свойства которых определяются концентрациями наполнителей. При этом задача условной оптимизации сведена к задаче безусловной минимизации с понижением размерности.

Преимуществом предлагаемого подхода является логичное разбиение задачи на последовательные этапы:

а) Построение множества решений прямой задачи вычисления эффективных характеристик. Такое вычисление может производиться независимо на любом количестве компьютеров в разное время с последующим тривиальным объединением результатов. Пересчет при этом требуется только при необходимости анализа новых материалов, т.к. ограничения будут использоваться на более позднем этапе. При необходимости проверки или увеличения точности расчет не надо выполнять заново, достаточно дополнить имеющиеся данные новыми расчетами.

б) Построение зависимостей эффективных характеристик от концентраций наполнителей с помощью аппроксимирующих функций, в качестве которых предложено использовать thin plate spline со сглаживанием.

в) Построение множества точек, удовлетворяющих ограничениям и построение границы множества точек, удовлетворяющих ограничениям, в результате получаем контур, который может быть параметризован.

г) Определение глобального минимума плотности на контуре с помощью пси-преобразования.

Необходимо отметить, что метод пси-преобразования не позволяет эффективно находить глобальный минимум при большом числе параметров. Это ограничивает его применимость в данной задаче небольшим числом наполнителей (порядка 3). Для случая большего числа наполнителей необходимо рассмотреть возможность использования специальных методов глобальной минимизации.

Исследование выполнено за счет средств Задания № 1.445.2014/К Минобрнауки РФ.

Список литературы

1. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984. 352 с.
2. Димитриенко Ю.И., Кашкаров А.И. Расчет эффективных характеристик композитов с периодической структурой методом конечного элемента // Вестник МГТУ им. Баумана. Сер. Естественные науки. 2002. № 2. С. 95-108.
3. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Беленовская Ю.В., Анискович В.А., Перевислов С.Н. Моделирование микроструктурного разрушения и прочности керамических композитов на основе реакционно-связанного SiC // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2013. № 11. С. 475-496. DOI: [10.7463/1113.0659438](https://doi.org/10.7463/1113.0659438)
4. Димитриенко Ю.И., Дроголюб А.Н., Соколов А.П., Шпакова Ю.В. Метод решения задачи оптимизации структуры дисперсно-армированных композитов при ограничениях на тепловые и прочностные свойства // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электронный журнал. 2013. № 11. С. 415-430. DOI: [10.7463/1113.0621065](https://doi.org/10.7463/1113.0621065)

5. Димитриенко Ю.И., Яковлев Н.О., Ерасов В.С., Федонюк Н.Н., Сборщиков С.В., Губарева Е.А., Крылов В.Д., Григорьев М.М., Прозоровский А.А. Разработка многослойного полимерного композиционного материала с дискретным конструктивно-ортотропным наполнителем // Композиты и наноструктуры. 2014. Т.6, № 1. С. 32-48.
6. Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В., Федонюк Н.Н. Моделирование вязкоупругих характеристик слоисто-волоконистых полимерных композиционных материалов // Наука и образование. Электронный журнал. 2014. № 11. С. 748-770. DOI: [10.7463/1114.0734246](https://doi.org/10.7463/1114.0734246)
7. Ghiasi H., Pasini D., Lessard L. Optimum Stacking Sequence Design of Composite Materials. Part I: Constant Stiffness Design // Composite Structures. 2009. Vol. 90, no. 1. P. 1-11. DOI: [10.1016/j.compstruct.2009.01.006](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2009.01.006)
8. Abdalla M.M., Kassapoglou C., Gürdal Z. Formulation of Composite Laminate Robustness Constraint in Lamination Parameters Space // Proceedings of 50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Conference, Palm Springs, May 2009. Art. no. AIAA 2009-2478. DOI: [10.2514/6.2009-2478](https://doi.org/10.2514/6.2009-2478)
9. Adams D.B., Watson L.T., Gürdal Z., Anderson-Cook C.M. Genetic algorithm optimization and blending of composite laminates by locally reducing laminate thickness // Advances in Engineering Software. 2004. Vol. 35, no. 1. P. 35-43. DOI: [10.1016/j.advenzsoft.2003.09.001](https://doi.org/10.1016/j.advenzsoft.2003.09.001)
10. Seresta O., Abdalla M.M., Gürdal Z. A Genetic Algorithm Based Blending Scheme for Design of Multiple Composite Laminates // Proceedings of 50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Conference, Palm Springs, California, USA, 2009. Art. no. AIAA 2009-2699. DOI: [10.2514/6.2009-2699](https://doi.org/10.2514/6.2009-2699)
11. Grosset L., Le Riche R., Haftka R.T. A double-distribution statistical algorithm for composite laminate optimization // Structural and Multidisciplinary Optimization. 2006. Vol. 31, no. 1. P. 49-59. DOI: [10.1007/s00158-005-0551-z](https://doi.org/10.1007/s00158-005-0551-z)
12. Giger M., Keller D., Ermanni P. A graph-based parameterization concept for global laminate optimization // Structural and Multidisciplinary Optimization. 2008. Vol. 36, no. 3. P. 289-305. DOI: [10.1007/s00158-007-0165-8](https://doi.org/10.1007/s00158-007-0165-8)
13. Димитриенко Ю.И. Тензорное исчисление. М.: Высшая школа, 2001. 576 с.
14. Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В. Асимптотическая теория конструктивно-ортотропных пластин с двухпериодической структурой // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 1. С. 36-57.
15. Duchon J. Splines Minimizing Rotation Invariant Semi-norms in Sobolev Spaces // In: Schempp W., Zeller K., eds. Constructive Theory of Functions of Several Variables. Springer Berlin Heidelberg, 1977. P. 85-100. DOI: [10.1007/BFb0086566](https://doi.org/10.1007/BFb0086566)

16. Bookstein F.L. Principal Warps: Thin-Plate Splines and the Decomposition of Deformations // IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 1989. Vol. 11, issue 6. P. 567-585. DOI: [10.1109/34.24792](https://doi.org/10.1109/34.24792)
17. Girosi F., Jones M., Poggio T. Regularization theory and neural networks architectures // Neural Computation. 1995. № 7. P. 219-269. DOI: [10.1162/neco.1995.7.2.219](https://doi.org/10.1162/neco.1995.7.2.219)
18. Donato G., Belongie S. Approximate Thin Plate Spline Mappings // Proceedings of Computer Vision — ECCV 2002. Part III. Springer Berlin Heidelberg, 2002. P. 21-31. DOI: [10.1007/3-540-47977-5_2](https://doi.org/10.1007/3-540-47977-5_2)
19. Чичинадзе В.К. Решение невыпуклых нелинейных задач оптимизации. М.: Наука, 1983. 256 с.
20. Прудков Е.Н., Кузьмина С.Е. Оптимизация составов и исследование свойств модифицированных эпоксидных композитов // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. 2010. № 4-2. С. 117-124.
21. Dimitrienko Yu.I., Efremov G.A., Chernyavsky S.A. Optimum design of erosion-stable heatshield composite materials // Applied Composite Materials. 1997. Vol. 4, no. 1. P. 35-52. DOI: [10.1007/BF02481387](https://doi.org/10.1007/BF02481387)
22. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П., Садовничий Д.Н., Гафаров Б.Р. Численное и экспериментальное моделирование прочностных характеристик сферопластиков // Композиты и наноструктуры. 2013. № 3. С. 35-51.

Spline Approximation-Based Optimization of Multi-component Disperse Reinforced Composites

Yu.I. Dimitrienko^{1,*}, A.N. Drogolyub¹,
E.A. Gubareva¹

*dimit.bmstu@gmail.com

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Keywords: optimization, optimal design, disperse reinforced composites, method of asymptotic averaging, finite element method, local problems, periodicity cell, spline approximation, elastic modules, strength, heat conductivity

The paper suggests an algorithm for solving the problems of optimal design of multicomponent disperse-reinforced composite materials, which properties are defined by filler concentrations and are independent of their shape. It formulates the problem of conditional optimization of a composite with restrictions on its effective parameters - the elasticity modulus, tension and compression strengths, and heat-conductivity coefficient with minimized composite density. The effective characteristics of a composite were computed by finite-element solving the auxiliary local problems of elasticity and heat-conductivity theories appearing when the asymptotic averaging method is applied.

The algorithm suggested to solve the optimization problem includes the following main stages:

- 1) finding a set of solutions for direct problem to calculate the effective characteristics;
- 2) constructing the curves of effective characteristics versus filler concentrations by means of approximating functions, which are offered for use as a thin plate spline with smoothing;
- 3) constructing a set of points to satisfy restrictions and a boundary of the point set to satisfy restrictions obtaining, as a result, a contour which can be parameterized;
- 4) defining a global density minimum over the contour through psi-transformation.

A numerical example of solving the optimization problem was given for a disperse-reinforced composite with two types of fillers being hollow microspheres: glass and phenolic. It was shown that the suggested algorithm allows us to find optimal filler concentrations efficiently enough.

References

1. Bakhvalov N.S., Panasenko G.P. *Osrednenie protsessov v periodicheskikh sredakh* [Averaging processes in periodic media]. Moscow, Nauka Publ., 1984. 352 p. (in Russian).

2. Dimitrienko Yu.I., Kashkarov A.I. Finite Element Method of Calculation of Efficient Characteristics of Composites with Periodical Structure. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Estestvennye nauki = Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Ser. Natural science*, 2002, no. 2, pp. 95-108. (in Russian).
3. Dimitrienko Yu.I., Sborshchikov S.V., Belenovskaya Yu.V., Aniskovich V.A., Perevislov S.N. Modeling microstructural destruction and strength of ceramic composites based on the reaction-bonded SiC. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana = Science and Education of the Bauman MSTU*, 2013, no. 11, pp. 475-496. DOI: [10.7463/1113.0659438](https://doi.org/10.7463/1113.0659438) (in Russian).
4. Dimitrienko Yu.I., Drogolyub A.N., Sokolov A.P., Shpakova Yu.V. Method for solving an optimization problem of the structure of fiber reinforced composites under restrictions on thermal and strength properties. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana = Science and Education of the Bauman MSTU*. 2013. № 11. С. 415-430. DOI: [10.7463/1113.0621065](https://doi.org/10.7463/1113.0621065) (in Russian).
5. Dimitrienko Iu.I., Iakovlev N.O., Erasov V.S., Fedoniuk N.N., Sborshchikov S.V., Gubareva E.A., Krylov V.D., Grigor'ev M.M., Prozorovskii A.A. Development of a multilayer polymer composite material with discrete structural-orthotropic fillers. *Kompozity i nanostruktury = Composites and Nanostructures*, 2014, vol. 6, no. 1, pp. 32-48. (in Russian).
6. Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Sborshchikov S.V., Fedonyuk N.N. Simulation of Viscoelastic Properties of Fibrous Laminated Polymer Composite Materials. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana = Science and Education of the Bauman MSTU*, 2014, no. 11, pp. 748-770. DOI: [10.7463/1114.0734246](https://doi.org/10.7463/1114.0734246) (in Russian).
7. Ghiasi H., Pasini D., Lessard L. Optimum Stacking Sequence Design of Composite Materials. Part I: Constant Stiffness Design. *Composite Structures*, 2009, vol. 90, no. 1, pp. 1-11. DOI: [10.1016/j.compstruct.2009.01.006](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2009.01.006)
8. Abdalla M.M., Kassapoglou C., Gürdal Z. Formulation of Composite Laminate Robustness Constraint in Lamination Parameters Space. *Proceedings of 50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Conference*, Palm Springs, May 2009. Art. no. AIAA 2009-2478. DOI: [10.2514/6.2009-2478](https://doi.org/10.2514/6.2009-2478)
9. Adams D.B., Watson L.T., Gürdal Z., Anderson-Cook C.M. Genetic algorithm optimization and blending of composite laminates by locally reducing laminate thickness. *Advances in Engineering Software*, 2004, vol. 35, no. 1, pp. 35-43. DOI: [10.1016/j.advengsoft.2003.09.001](https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2003.09.001)
10. Seresta O., Abdalla M.M., Gürdal Z. A Genetic Algorithm Based Blending Scheme for Design of Multiple Composite Laminates. *Proceedings of 50th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Conference*, Palm Springs, California, USA, 2009. Art. no. AIAA 2009-2699. DOI: [10.2514/6.2009-2699](https://doi.org/10.2514/6.2009-2699)
11. Grosset L., Le Riche R., Haftka R.T. A double-distribution statistical algorithm for composite laminate optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2006, vol. 31, no. 1, pp. 49-59. DOI: [10.1007/s00158-005-0551-z](https://doi.org/10.1007/s00158-005-0551-z)

12. Giger M., Keller D., Ermanni P. A graph-based parameterization concept for global laminate optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2008. vol. 36, no. 3, pp. 289-305. DOI: [10.1007/s00158-007-0165-8](https://doi.org/10.1007/s00158-007-0165-8)
13. Dimitrienko Yu.I. *Tenzornoe ischislenie* [Tensor Calculus]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 2001. 576 p. (in Russian).
14. Dimitrienko Iu.I., Gubareva E.A., Sborshchikov S.V. Asymptotic theory of constructive-orthotropic plates with two-periodic structures. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennyye metody*, 2014, no. 1, pp. 36-57. (in Russian).
15. Duchon J. Splines Minimizing Rotation Invariant Semi-norms in Sobolev Spaces. In: Schempp W., Zeller K., eds. *Constructive Theory of Functions of Several Variables*. Springer Berlin Heidelberg, 1977, pp. 85-100. DOI: [10.1007/BFb0086566](https://doi.org/10.1007/BFb0086566)
16. Bookstein F.L. Principal Warps: Thin-Plate Splines and the Decomposition of Deformations. *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1989, vol. 11, iss. 6, pp. 567-585. DOI: [10.1109/34.24792](https://doi.org/10.1109/34.24792)
17. Girosi F., Jones M., Poggio T. Regularization theory and neural networks architectures. *Neural Computation*, 1995, no. 7, pp. 219-269. DOI: [10.1162/neco.1995.7.2.219](https://doi.org/10.1162/neco.1995.7.2.219)
18. Donato G., Belongie S. Approximate Thin Plate Spline Mappings. In: *Proceedings of Computer Vision — ECCV 2002. Part III*. Springer Berlin Heidelberg, 2002, pp. 21-31. DOI: [10.1007/3-540-47977-5_2](https://doi.org/10.1007/3-540-47977-5_2)
19. Chichinadze V.K. *Reshenie nevy puklykh nelineinykh zadach optimizatsii* [Solution of non-convex nonlinear optimization problems]. Moscow, Nauka Publ., 1983. 256 p. (in Russian).
20. Prudkov E.N., Kuz'mina S.E. Optimization composition and research of the features modified epoxide composites. *Izvestiya Tul'skogo gosudarstvennogo universiteta. Tekhnicheskie nauki*, 2010, no. 4-2, pp. 117-124. (in Russian).
21. Dimitrienko Yu.I., Efremov G.A., Chernyavsky S.A. Optimum design of erosion-stable heatshield composite materials. *Applied Composite Materials*, 1997, vol. 4, no. 1, pp. 35-52. DOI: [10.1007/BF02481387](https://doi.org/10.1007/BF02481387)
22. Dimitrienko Yu.I., Sborshchikov S.V., Sokolov A.P., Sadovnichiy D.N., Gafarov B.R. Computer and experimental study modeling of failure of micro-sphere filled composite. *Kompozity i nanostruktury = Composites and nanostructures*, 2013, no. 3, pp. 35-51. (in Russian).