

## **Etapa 3**

# **Dezvoltarea cercetării industriale a noului concept de tipărire cu cerneluri reactive având microstructura controlată optimizată.**

### **Obiectivele din planul de realizare al proiectului prevăzute pentru anul 2022**

În cadrul Etapei 3 cu titlul *Dezvoltarea cercetării industriale a noului concept de tipărire cu cerneluri reactive având microstructura controlată optimizată* au fost prevăzute în planul de realizare următoarele activități și rezultate estimative verificabile.

Pentru întreaga etapă, rezultatele sunt stabilite astfel:

1. Metodologie de calcul a funcției obiectiv și definire a modelelor microstructurii.
2. Încercări experimentale și validare experimentală a analizelor cu elemente finite.
3. Publicarea de articole în reviste și în volumele unor conferințe naționale și internaționale.

Activitățile desfășurate de UPB prevăzute în planul de realizare sunt:

#### **Activitatea 3.1**

***Definirea numerică cantitativă a funcției obiectiv reprezentativă pentru rigiditate, rezistență și tenacitate în funcție de parametrii de proiectare ai materialelor prototipate***

Rezultat estimativ verificabil:

*Definirea numerică a funcției obiectiv reprezentative în funcție de parametrii de proiectare*

#### **Activitatea 3.2**

***Stabilirea microstructurilor dorite. Obținerea microstructurilor tipărite pentru validarea modelelor și optimizarea secvenței rețelelor***

În această etapă producătorul materialelor Joanneum Research Materials din Austria a realizat tipărirea materialelor în diferite configurații a straturilor urmărind posibila îmbunătățire a proprietăților mecanice. Materiale cu nanoparticule nu au fost încă tipărite datorită dificultăților întâmpinate la printare.

Rezultat estimativ verificabil:

#### **Activitatea 3.3**

***Dezvoltarea modelelor și a algoritmului de optimizare***

Rezultat estimativ verificabil:

*Dezvoltarea numerică a algoritmilor de optimizare în funcție de proprietățile dorite ale eșantioanelor tipărite*

#### **Activitatea 3.4**

***Încercarea mecanică a materialelor cu microstructuri eterogene având microstructura stocastică modificată ca referință a eșantioanelor prototipate 3D***

Rezultat estimativ verificabil:

*Caracterizarea mecanică a proprietăților materialelor tipărite cu cerneluri reactive*

#### **Activitatea 3.5**

***Validarea modelelor. Caracterizare DSC, tribologică, de stabilitate termică și microscopică***

Încercările tribologice, de stabilitate termică și analizele microscopice SEM revin partenerului din proiect INCAS S.A.

Rezultat estimativ verificabil:

*Sinteză a rezultatelor obținute experimental în vederea stabilirii materialelor care urmează să fie tipărite aditiv cu cerneluri reactive, având proprietăți mecanice îmbunătățite*

#### **Activitatea 3.6**

***Încercarea mecanică a epruvetelor cu gradient funcțional. Validarea datelor pentru modelarea numerică***

Încercări de tracțiune și încovoiere pentru materialele noi. Validarea cu rezultatele obținute din modele numerice.

#### **Activitatea 3.7**

***Diseminare rezultate***

Rezultat estimativ verificabil:

*Articole publicate în reviste și comunicate la conferințe internaționale.*

### **3. Dezvoltarea modelelor și a algoritmului de optimizare**

#### **(Activitatea 3.3)**

În etapa anterioară din anul 2021 s-au considerat distribuții de material "tare"/"moale" în volume reprezentative (RVE) ale structurilor periodice 2D de formă dreptunghiulară (pătrată) cu două plane de simetrie pentru care condițiile la limită ale structurilor periodice se pot aplica mai simplu. Astfel spațiul de lucru în optimizare se poate reduce la 1/4 din RVE dar o parte din relizările posibile se pierd prin impunerea dublei simetrii. Pentru a extinde numărul realizărilor posibile la structuri periodice s-au imaginat zece variante de distribuție predefinită ("patern") a materialului "tare" și "moale" în diverse RVE pentru care condițiile de simetrie reflexivă, care reduc modelul de calcul, nu mai sunt necesare. S-a implementat mai întâi algoritmul de aplicare al condițiilor la limită pentru structuri periodice generale care se încadrează într-un dreptunghi și pentru care sunt necesare relații de legătură complexe ("constraint equations" în loc de "couplings" sau deplasări impuse nenule) între gradele de libertate pe pe fețele opuse.

Cele zece variante de RVE analizate pentru a obține structuri periodice care să satisfacă diverse cerințe au fost implementate și rulate în Ansys APDL în domeniul liniar elastic pentru extragerea completă a matricelor de rigiditate în formă omogenizată pentru spații de proiectare cu 16 pixeli de diferite forme (pătrat, romb, hexagonali, circulari). Pentru a elimina dependența rezultatelor de finețea discretizării (în special pentru modele în care fiecare pixel dreptunghiular era discretizat în doar un element finit) s-au efectuat analize de convergență și s-au ales discretizări mai fine adaptate fiecărui caz în parte. S-a constatat că pixelii de formă circulară sunt mai puțin sensibili la finețea discretizării și din acest motiv șapte din variantele de alegere a RVE au fost dublate de folosirea pixelilor circulari deși în acest fel fracția volumică a materialului tare se reduce ușor deoarece s-a considerat că între pixelii circulari din material "tare" se dispune material "moale". S-au analizat toate posibilitățile de alegere a fracțiilor volumice pentru toate RVE analizate, rezultând astfel un număr foarte mare de realizări care poate fi folosit într-un algoritm de "machine learning".

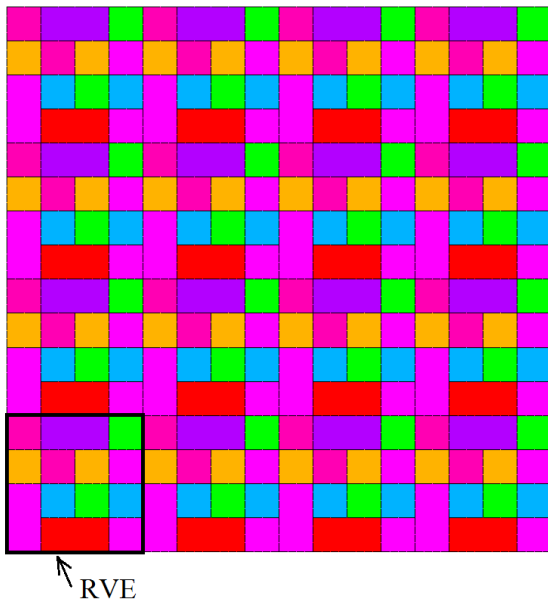
O parte dintre variantele de alegere a RVE au fost inspirate din literatura de specialitate iar restul au fost rezultatul acumulărilor obținute în timpul analizării primelor. Aceste variante de alegere a RVE se prezintă pe scurt în continuare. Pentru posibile viitoare analize, implementările efectuate permit introducerea mai multor seturi de materiale pentru pixelii din spațiul de lucru (în cazul de față, maxim 16 materiale deoarece s-a lucrat pe un spațiu de lucru cu doar 16 pixeli).

Totodată, modelele descrise în acest capitol au fost implementate în algoritmi de optimizare bazați pe metoda greedy și funcțiile de optimizare dezvoltate până în prezent.

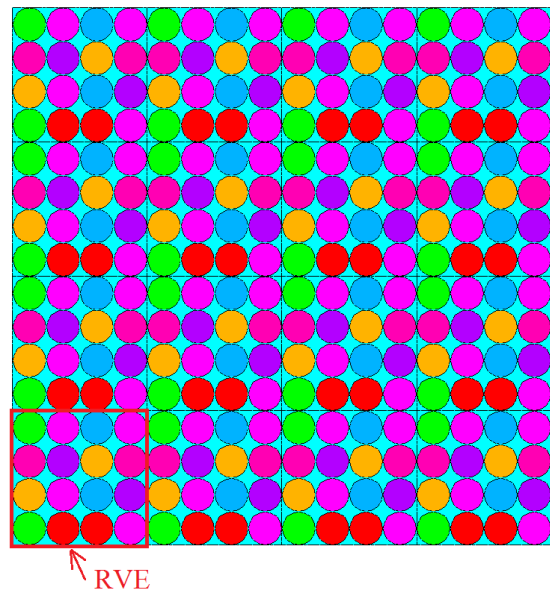
### **3. 1. RVE cu pixeli încadrați într-un dreptunghi**

Se consideră o structură periodică 2D (Fig. 3.1) pentru care pixelii din RVE, de formă pătratică sau circulară se dispun într-un dreptunghi cu  $NE_x = 4$  pixeli pe orizontală și  $NE_y = 4$  pixeli pe verticală. Fiecare pixel poate să fie teoretic din alt material, dar practic, în acest raport, din material moale sau tare. Pentru controlul distribuției de material, fiecare pixel din RVE se identifică printr-un număr. Regula de numerotare aleasă se prezintă în Fig. 3.2. Elementele finite din componența pixelilor pot fi patrulatere cu patru noduri Q4 sau patrulatere cu opt noduri Q8. De regulă, pentru creșterea preciziei elementele Q8 sunt preferate. Discretizările prezentate în Fig. 3.3 sunt cele considerate minimale pentru a obține soluții acceptabile, ele pot fi "rafinare" astfel încât fiecare element finit patrulater este împărțit în alte patru elemente finite patrulatere.

Numărul de pixeli din fiecare material, precum și raza pixelului circular se consideră date de intrare. Raza maximă a pixelului circular se limitează în raport cu pătratul în care se înscrie pentru a nu obține elemente finite distorsionate. Pixelul circular asigură o arie maxim posibilă de 0.785 din aria pătratului în care se înscrie, dar practic acest coeficient se limitează la 0.700.

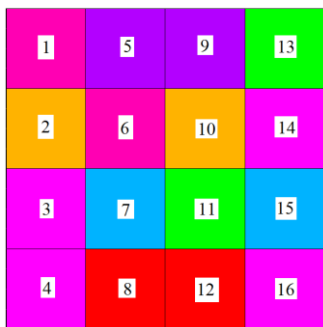


(a) Pixeli pătrați

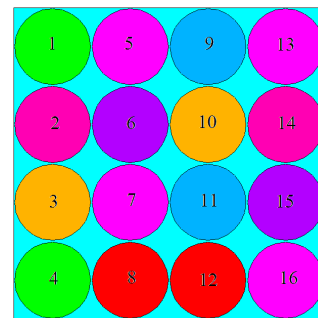


(b) Pixeli circulari - între pixeli se consideră același material, aici material moale

**Fig. 3.1.** Structuri periodice formate din RVE cu  $NE_x \times NE_y$  pixeli. Fiecare pixel poate fi dintr-un material omogen cu proprietăți specificate. Culori diferite corespund la materiale cu proprietăți diferite. Reprezentarea de față include pixeli din maxim opt materiale.

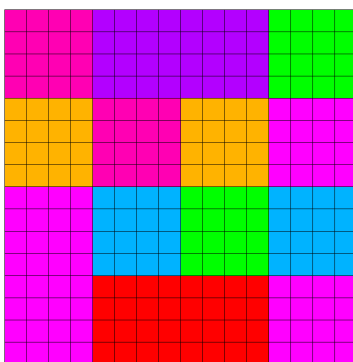


(a) Pixeli pătrați

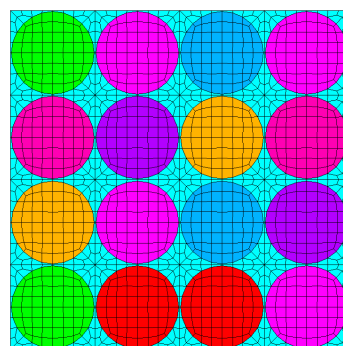


(b) Pixeli circulari - între pixeli se consideră același material, aici materialul cel mai moale

**Fig. 3.2.** Regula de numerotare a pixelilor din RVE cu  $NE_x = 4 \times NE_y = 4$  pixeli.



(a) Pixeli pătrați



(b) Pixeli circulari - între pixeli se consideră același material, aici materialul cel mai moale

**Fig. 3.3.** Discretizarea de bază a pixelilor din RVE cu elemente Q8 pentru cazul  $NE_x = 4 \times NE_y = 4$  pixeli.

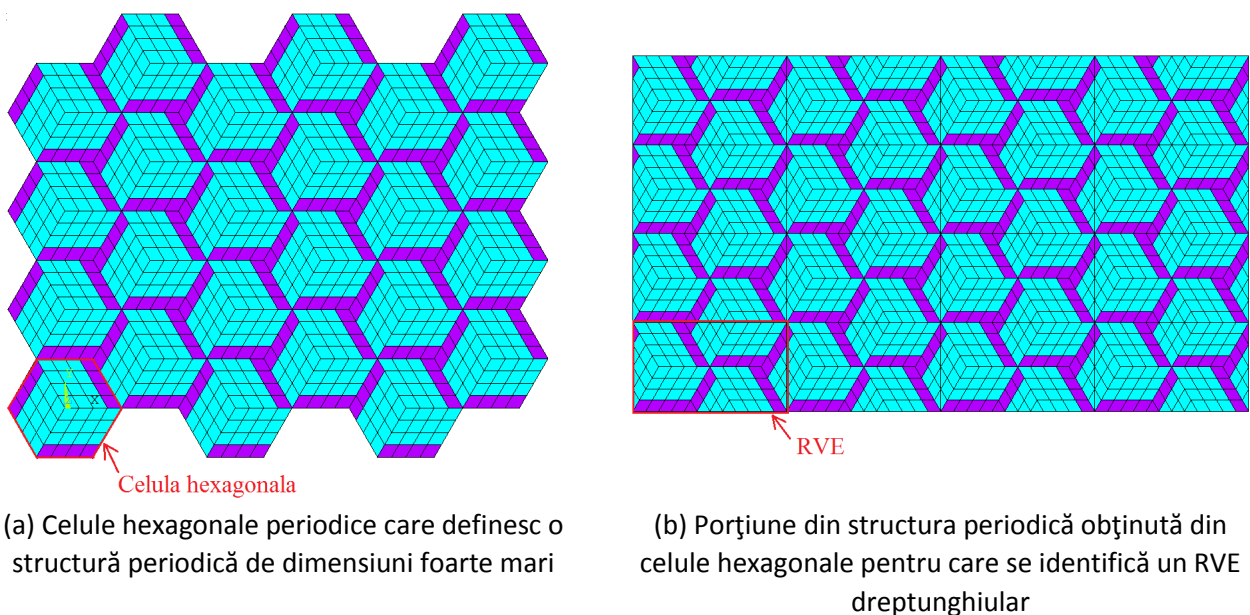
### 3.2. RVE hexagonal cu pixeli încadrați într-un romb rotit de trei ori

Se consideră o structură periodică 2D (Fig. 3.4) pentru care pixelii din RVE, de formă romboidală (sau circulară) se dispun într-un hexagon cu  $NE_x = 4$  pixeli pe fiecare latură. Fiecare pixel poate să fie teoretic din alt material, dar practic, în acest raport, din material moale sau tare. Pentru controlul distribuției de material, fiecare pixel din RVE se identifică printr-un număr. Regula de numerotare aleasă pentru zona de bază se prezintă în Fig. 3.5 pentru pixeli de formă circulară.

Deoarece condițiile la limită de periodicitate se pun mult mai simplu pe zone dreptunghiulare, RVE folosit în modelare se prezintă în Fig. 3.6, care practic conduce la aceeași distribuție ca și structura generată din celulele hexagonale. Regula de numerotare a pixelilor se prezintă în Fig. 3.7. Fiecare pixel este format din minim 4 arii.

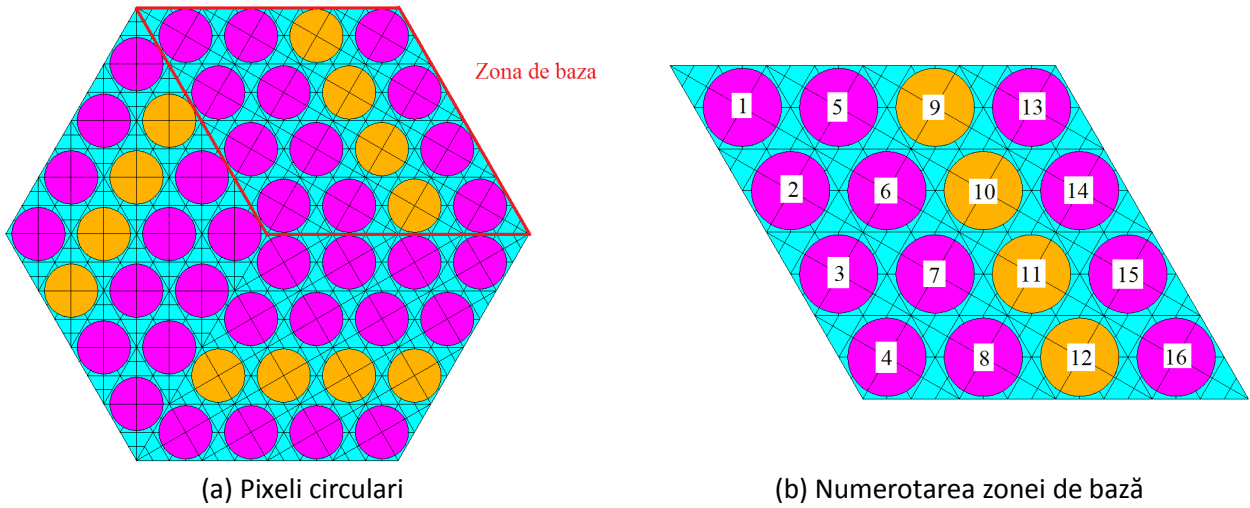
Elementele finite din componența pixelilor pot fi patrulatere cu patru noduri Q4 sau patrulatere cu opt noduri Q8. De regulă, pentru creșterea preciziei elementele Q8 sunt preferate. Discretizările prezentate în Fig. 3.8 cu doar 12 elemente finite relativ distorsionate dar acceptabile sunt cele considerate minimale pentru a obține soluții corecte, ele pot fi "rafinare" astfel încât fiecare element finit patrulater este împărțit în alte patru elemente finite patrulatere. Discretizări controlate au fost realizate și pentru pixelii de formă circulară dispuși după aceeași regulă.

Numărul de pixeli din fiecare material, precum și raza pixelului circular se consideră date de intrare. Raza maximă a pixelului circular se limitează în raport cu rombul în care se înscrie pentru a nu obține elemente finite distorsionate. Pixelul circular asigură o arie maxim posibilă de 0.68017 din aria rombului în care se înscrie, dar practic acest coeficient se limitează la 0.600.

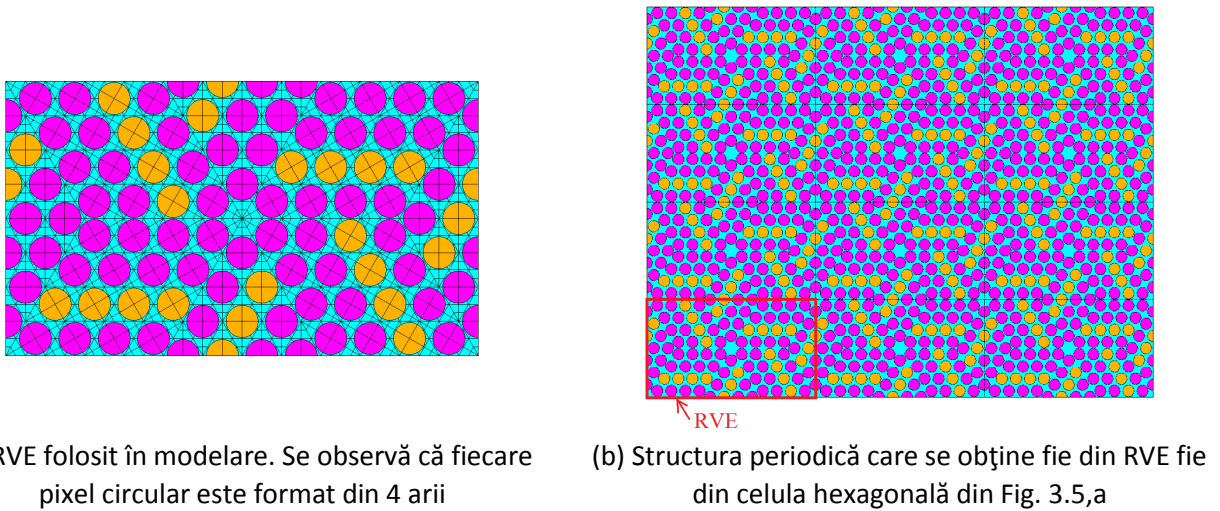


**Fig. 3.4.** Structuri periodice formate din RVE generate din structuri hexagonale obținute prin rotirea unui romb cu  $NE_x \times NE_x$  ( $NE_x = 4$ ) pixeli romboidali, numit zona de bază. Fiecare pixel poate fi dintr-un material omogen cu proprietăți specificate. Culori diferite corespund la materiale cu proprietăți diferite.

Reprezentarea de față include pixeli din două materiale.



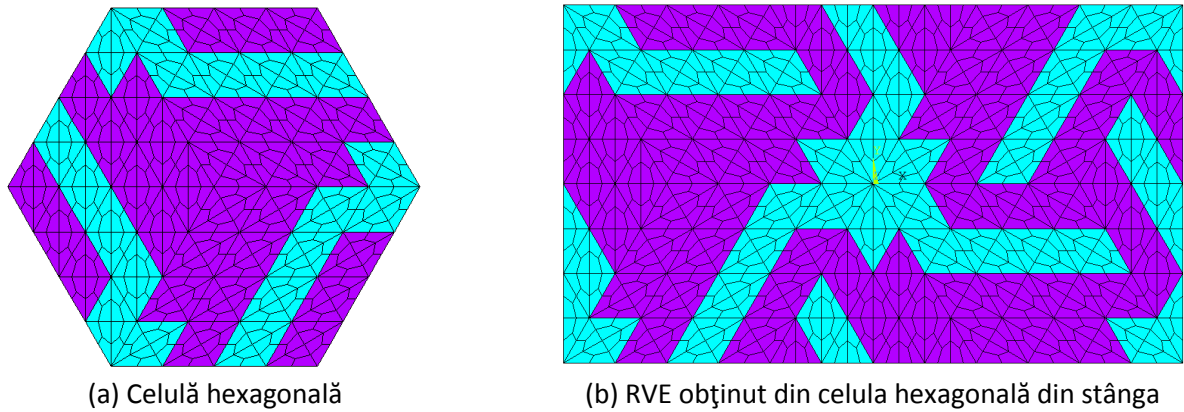
**Fig. 3.5.** Celula hexagonală cu pixeli circulari și regula de numerotare a pixelilor zona de bază



**Fig. 3.6.** RVE dreptunghiular pentru celula hexagonală din Fig. 3.5 și structura periodică obținută din aceasta sau din celula hexagonală.



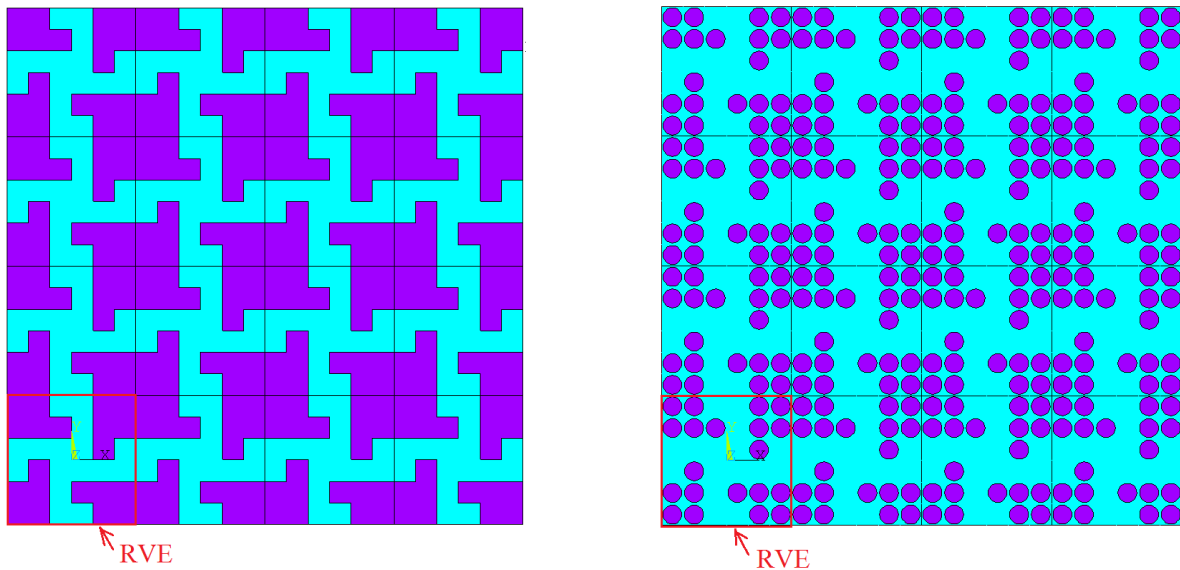
**Fig. 3.7.** Regula de numerotare a pixelilor din RVE. Se observă că un pixel din zona de bază se regăsește  $3 \times 2 = 6$  ori în RVE.



**Fig. 3.8.** Discretizarea de bază a pixelilor romboidali cu elemente Q4 sau Q8 distorsionate dar care respectă criteriile impuse de programele comerciale.

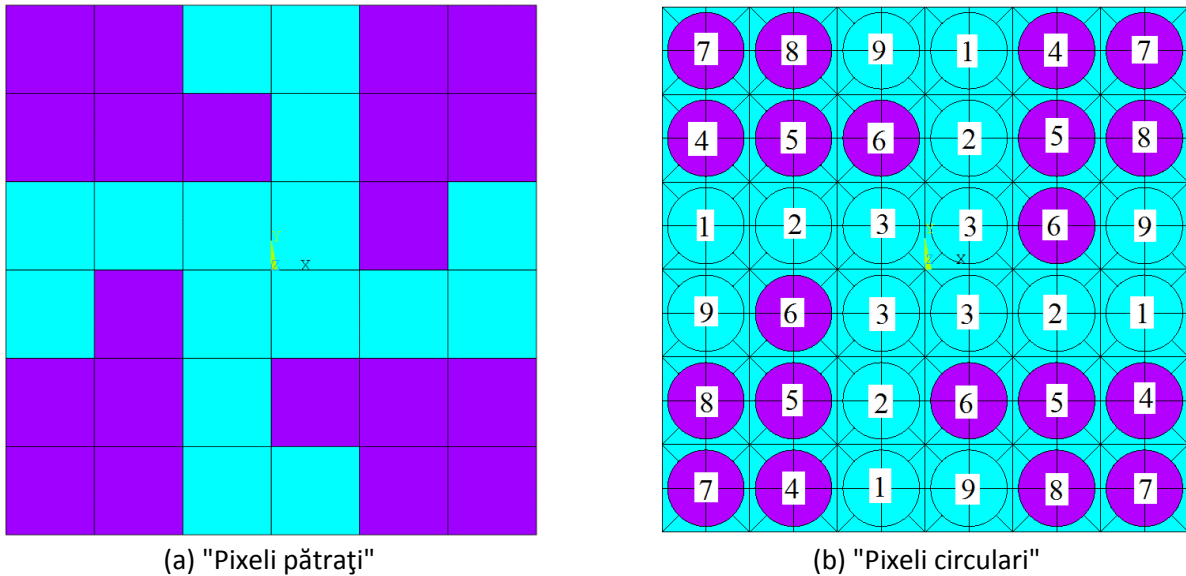
### 3.3. RVE cu pixeli încadrați într-un pătrat rotit de patru ori

Se consideră un domeniu 2D cu simetrie periodică (Fig. 3.9) în care celula care se repetă (RVE) este pătrată cu simetrie "tetragonală" (sau "cubică") din două sau mai multe materiale diferite. Deoarece celula este pătrată condițiile de periodicitate (PBC) se aplică simplu.



**Fig. 3.9.** Exemple de structuri 2D tetragonale infinite periodice formate din celule pătrate sau circulare din material tare și moale

Dacă se reține RVE din Fig. 3.9 (vezi Fig. 3.10) atunci pixelii care trebuie controlați pentru a păstra simetria sunt doar în zona de bază 1/4 din RVE - cadranul 1. Folosind numerotarea propusă se poate implementa algoritmul de optimizare în mod similar cu cele anterioare, cu mențiunea că un "pixel curent" este înlocuit cu un număr de pixeli dispuși după regula prezentată în Fig. 3.10b.



**Fig. 3.10.** Forma (pătrat sau circulară) și numerotarea "pixelilor" care definesc RVE din Fig. 3.9.

Deși materialul omogenizat rezultă "cubic" conform teoriei, în implementarea de față se folosesc tot trei cazuri de încărcare. Din acest exemplu de structuri periodice particulare rezultă avantajul folosirii în optimizare a unui singur caz de încărcare așa cum s-a demonstrat anterior.

### 3.4. RVE hexagonal cu pixeli triunghiulari sau circulari încadrați într-un triunghi rotit de șase ori sau cu simetrie reflexivă și rotit de trei ori

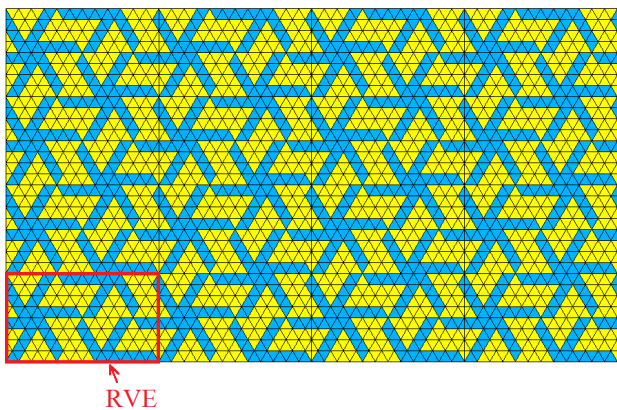
Se consideră o structură periodică 2D (Fig. 3.11) pentru care pixelii din RVE, de formă triunghiulară se dispun într-un hexagon cu  $NE_x = 4$  pixeli pe fiecare latură. Fiecare pixel poate să fie teoretic din alt material, dar practic, în acest raport, din material moale sau tare. Celulele hexagonale se obțin prin rotire sau reflexie și rotirea zonei de bază așa cum se prezintă în Fig. 3.12. Regula de numerotare aleasă pentru zona de bază se prezintă în Fig. 3.13 pentru pixelii de formă triunghiulară.

Elementele finite din componența pixelilor pot fi patrulatere cu patru noduri Q4 sau patrulatere cu opt noduri Q8. De regulă, pentru creșterea preciziei elementele Q8 sunt preferate. Discretizările inițiale cu număr minimal de elemente finite patrulatere, riguros controlate pot fi "rafinare" astfel încât fiecare element finit patrulater este împărțit în alte patru elemente finite patrulatere. Discretizări controlate au fost realizate și pentru pixelii de formă circulară dispuși după aceeași regulă (Fig. 3.14).

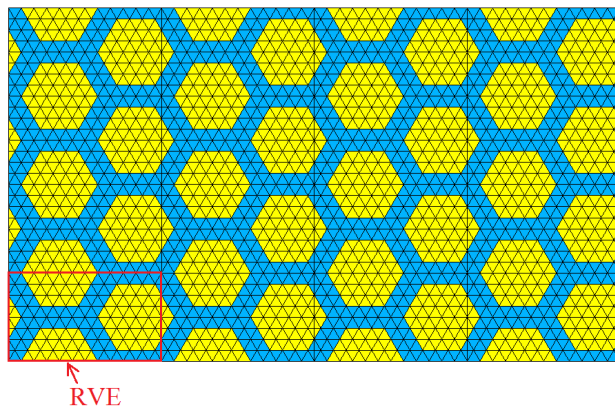
Numărul de pixeli din fiecare material, precum și raza pixelului circular se consideră date de intrare. Raza maximă a pixelului circular se limitează în raport cu triunghiul în care se înscrie pentru a nu obține elemente finite distorsionate. Pixelul circular asigură o arie maxim posibilă de 0.6046 din aria triunghiului în care se înscrie, dar practic acest coeficient se limitează la 0.55.

Pentru distribuția particulară (culorile pixelilor) considerată în zona de bază din Fig. 3.14,b în cele două variante de generare rezultă structurile periodice cu pixeli circulari din Fig. 3.15 care "seamănă" cu cele din Fig. 3.11.



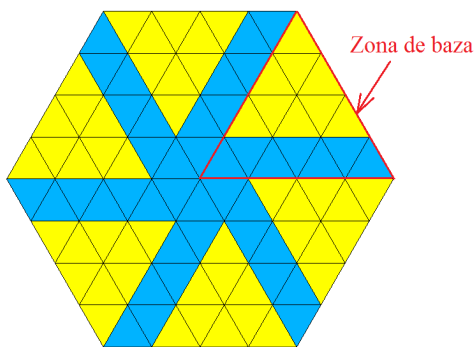


(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de șase ori a triunghiului de bază

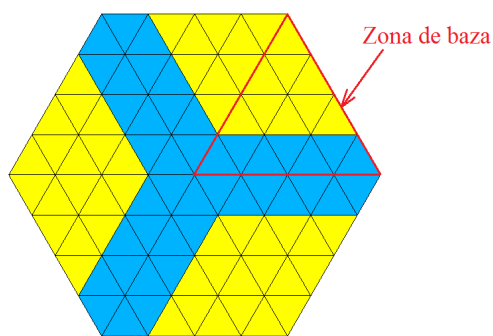


(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de trei ori a triunghiului de bază reflectat

**Fig. 3.11.** Structuri periodice formate din RVE generate din structuri hexagonale obținute prin rotirea unui triunghi sau reflexia și rotirea unui triunghi de bază cu pixeli triunghiulari. Fiecare pixel poate fi dintr-un material omogen cu proprietăți specificate. Culori diferite corespund la materiale cu proprietăți diferite. Reprezentarea de față include pixeli din două materiale.

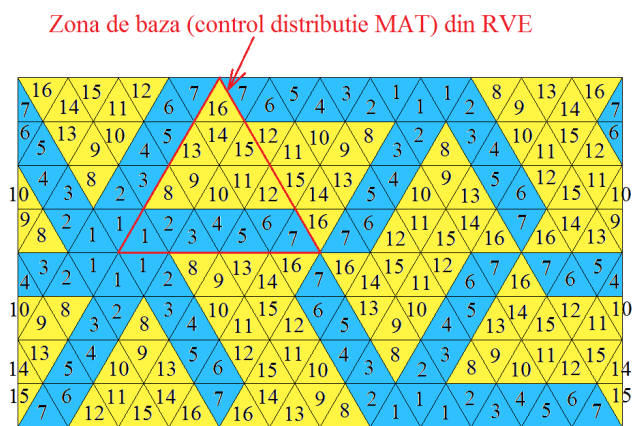


(a) Zona de bază rotită de 6 ori cu  $60^\circ$  (simetrie ciclică)

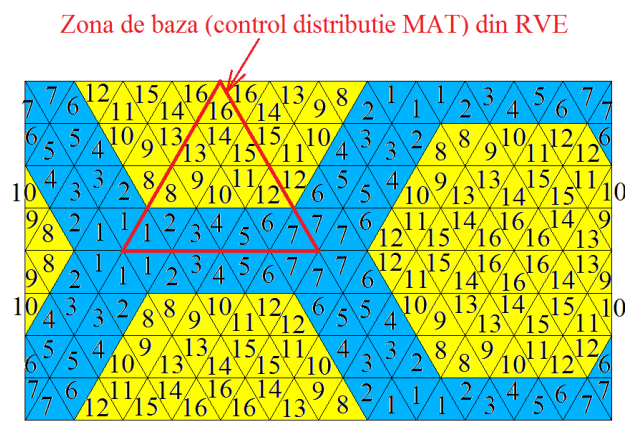


(b) Zona de bază reflectată și apoi rotită de 3 ori cu  $120^\circ$  (simetrie reflexivă și ciclică)

**Fig. 3.12.** Celula hexagonală cu pixeli triunghiulari

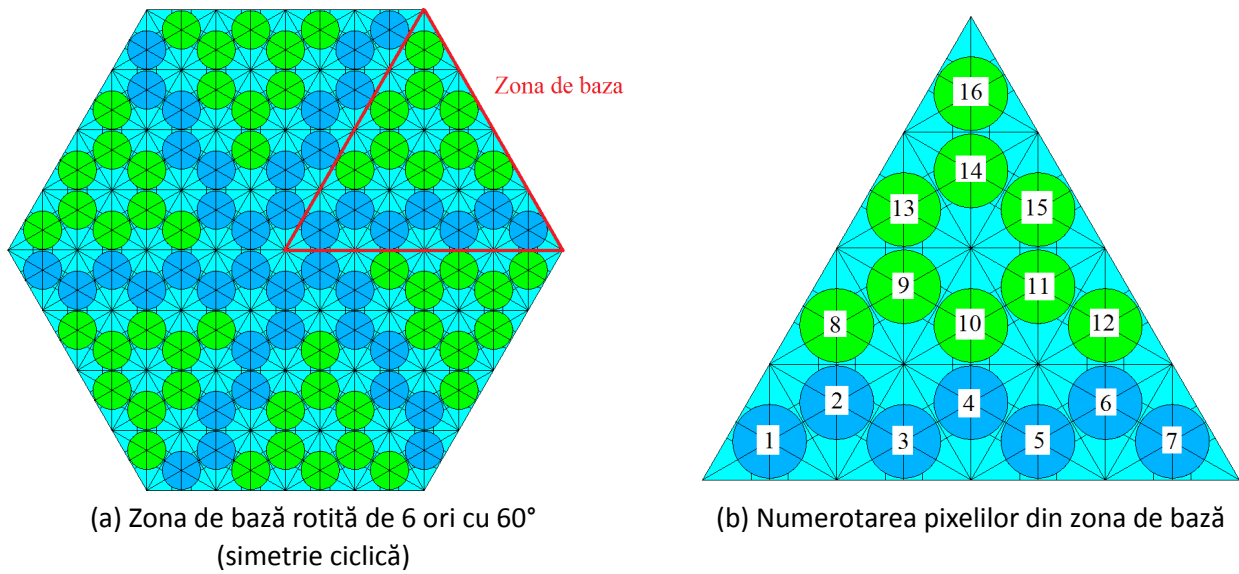


(a) simetrie ciclică

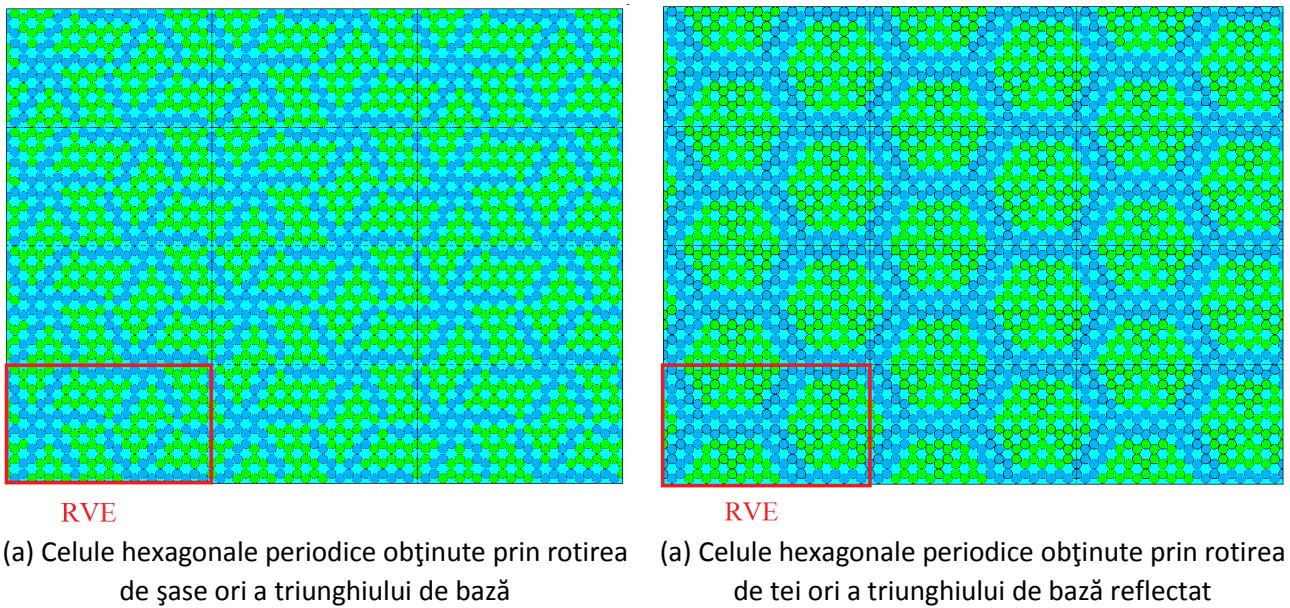


(b) simetrie reflexivă și ciclică

**Fig. 3.13.** Regula de numerotare a pixelilor din RVE. Se observă că fiecare pixel din zona de bază se regăsește  $6 \times 2 = 12$  ori în RVE.



**Fig. 3.14.** Celula hexagonală cu pixeli circulari. Materialul dintre pixelii circulari se consideră moale.



RVE

(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de șase ori a triunghiului de bază

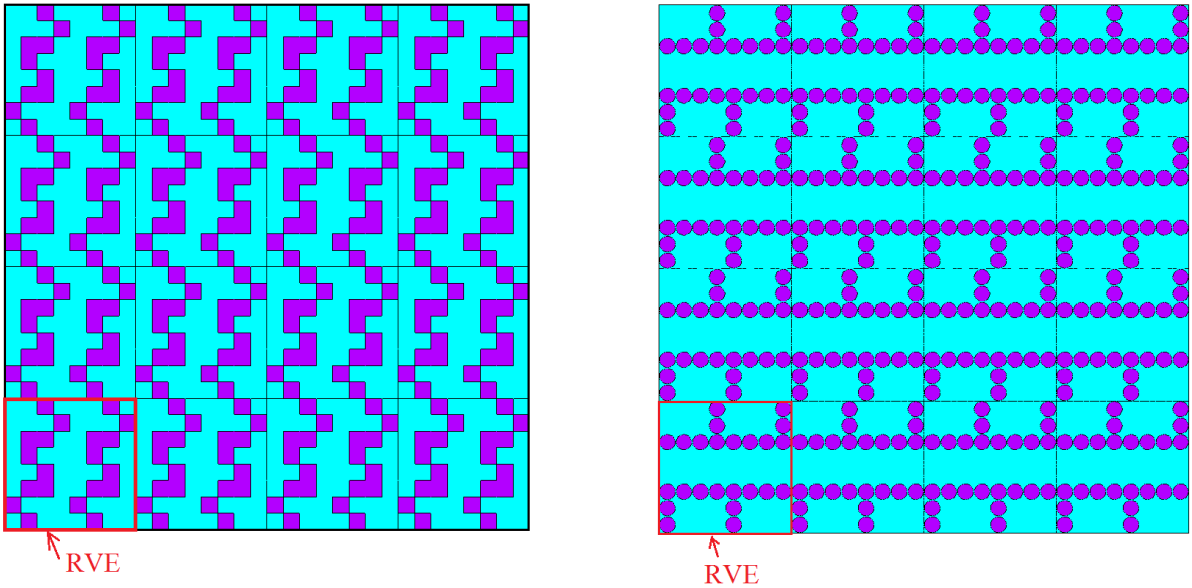
RVE

(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de trei ori a triunghiului de bază reflectat

**Fig. 3.15.** Structuri periodice formate din RVE generate din structuri hexagonale cu pixeli circulari

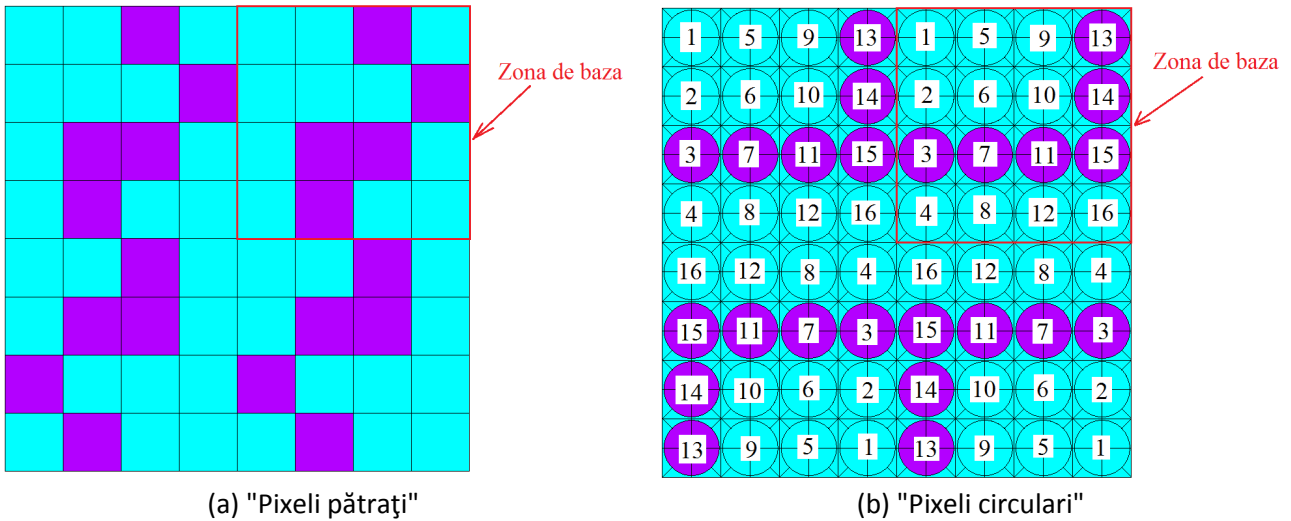
### 3.5. RVE cu pixeli pătrați sau circulari încadrați într-un pătrat dublat și rotit

Se consideră un domeniu 2D cu simetrie periodică (Fig. 3.16) în care celula care se repetă (RVE) este pătrată obținută din zona de bază prin copiere la stânga și apoi cele două pătrate se rotesc  $180^\circ$ . Deoarece RVE este de formă pătrată condițiile de periodicitate (PBC) se aplică simplu [Barbero].



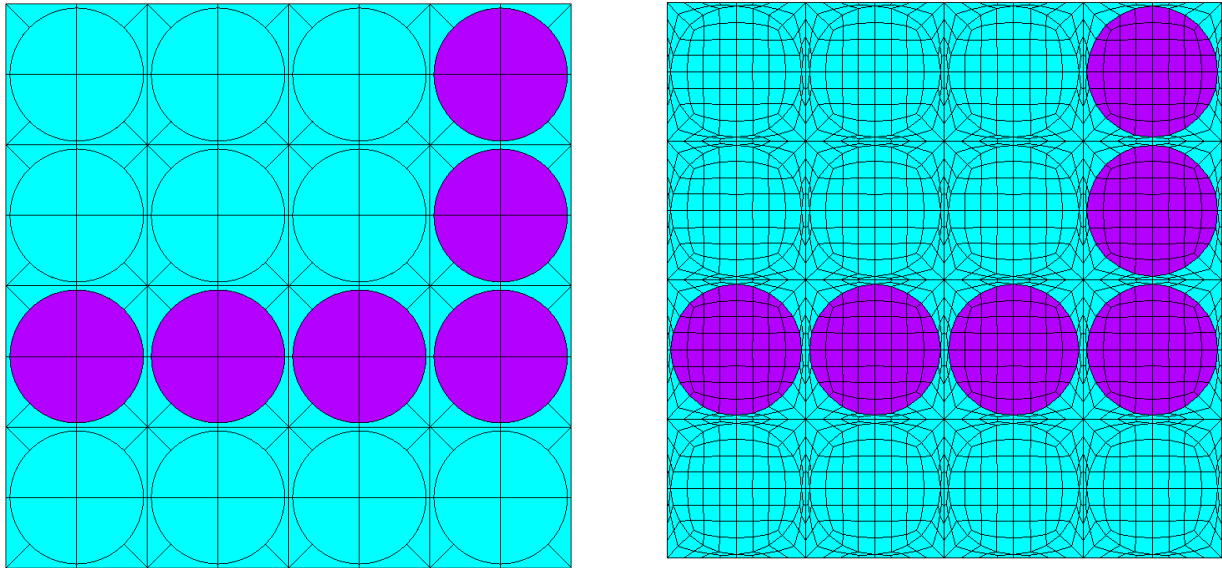
**Fig. 3.16.** Exemple de structuri 2D infinite periodice formate din RVE obținute prin translația zonei de bază și rotirea cu  $180^\circ$  a acestora. Pixelii pot fi pătrați sau circulari din material tare și moale.

Dacă se reține RVE din Fig. 3.16 (vezi Fig. 3.17) atunci pixelii care trebuie controlați pentru a păstra simetria sunt doar în zona de bază  $1/4$  din RVE - cadranul 1. Folosind numerotarea propusă se poate implementa algoritmul de optimizare în mod similar cu cele anterioare, cu mențiunea că un "pixel curent" este înlocuit cu un număr de pixeli dispuși după regula prezentată în Fig. 3.17,b.



**Fig. 3.17.** Forma (pătrat sau circulară) și numerotarea "pixelilor" care definesc RVE din Fig. 3.16.

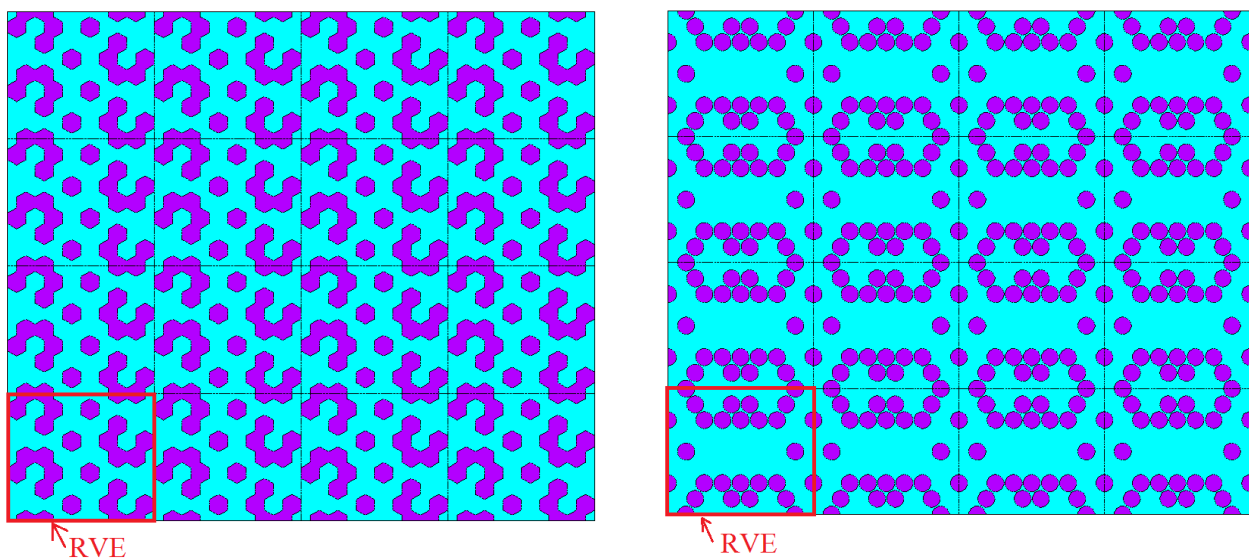
Numărul de pixeli din fiecare material, precum și raza pixelului circular se consideră date de intrare. Raza maximă a pixelului circular se limitează în raport cu pătratul în care se înscrie pentru a nu obține elemente finite distorsionate. Pixelul circular asigură o arie maxim posibilă de 0.785 din aria pătratului în care se înscrie, dar practic acest coeficient se limitează la 0.75 deoarece elementele finite dintre zonele circulare prezintă distorționări așa cum se observă în Fig. 3.18.



**Fig. 3.18.** Ariile din zona de bază care definesc pixelii circulari și discretizarea de referință cu elemente Q4 sau Q8 atunci când aria pixelului circular este 0.75 din aria pătratului care o conține. Se observă că toate elementele finite sunt patrulatere.

### 3.6. RVE cu pixeli hexagonali sau circulari încadrați într-un dreptunghi de bază dublat și rotit sau reflectat de două ori

Se consideră un domeniu 2D cu simetrie periodică (Fig. 3.19) în care celula care se repetă (RVE) este dreptunghiulară obținută din zona de bază prin copiere verticală în jos și apoi cele două dreptunghiuri se rotesc  $180^\circ$  sau zona de bază se reflectează de două ori. Deoarece RVE este de formă dreptunghiulară condițiile de periodicitate (PBC) se aplică simplu.



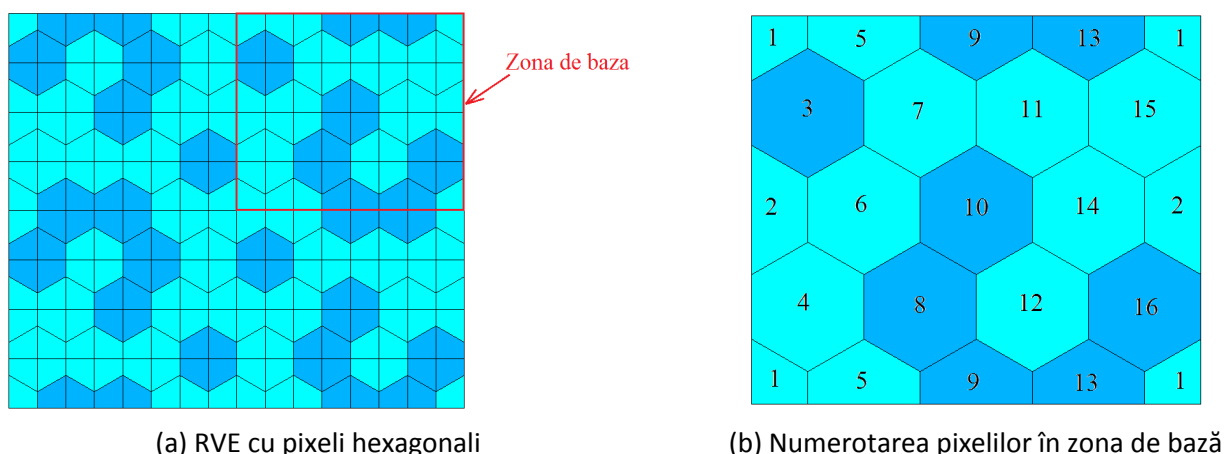
(a) RVE obținut prin copierea în jos a zonei de bază și apoi rotirea cu  $180^\circ$  - pixeli hexagonali

(b) RVE obținut prin dubla reflexie a zonei de bază - pixeli circulari

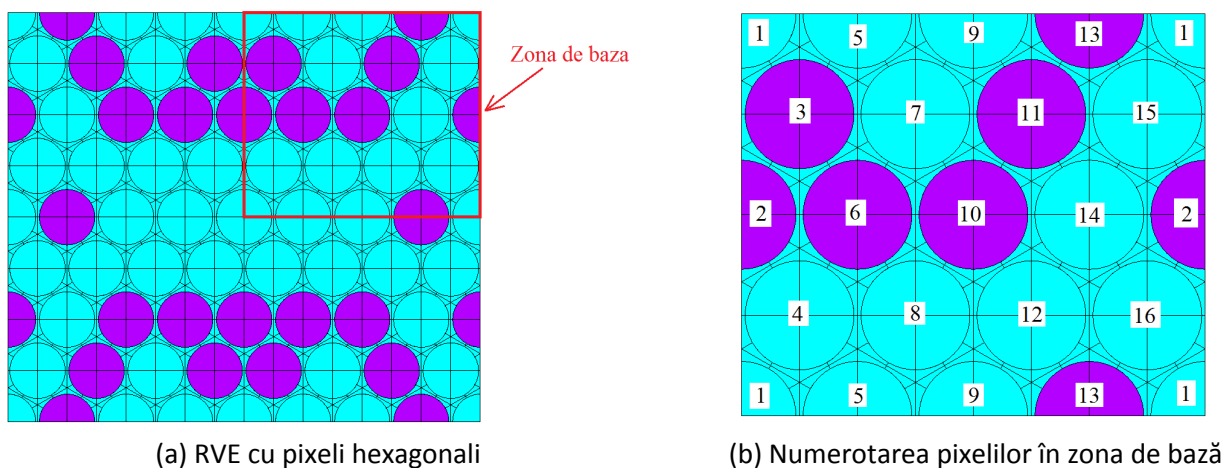
**Fig. 3.19.** Exemple de structuri 2D infinit periodice formate din RVE obținute prin translația verticală a zonei de bază și rotirea cu  $180^\circ$  a acestora sau prin dublă reflexie. Pixelii pot fi hexagonali sau circulari din

material tare și moale sau chiar din mai mult de două materiale.

Dacă se reține RVE din Fig. 3.19 (vezi Fig. 3.20 și Fig. 3.21) atunci pixelii care trebuie controlați considerând modul de obținere a lor sunt doar în zona de bază 1/4 din RVE - cadranul 1. Folosind numerotarea propusă se poate implementa algoritmul de optimizare în mod similar cu cele anterioare, cu mențiunea că un "pixel curent" este înlocuit cu un număr de pixeli dispuși după regula prezentată în Fig. 3.20,a.



**Fig. 3.20.** RVE din Fig. 3.19,a și numerotarea pixelilor hexagonali. Se observă că din condiții pe periodicitate anumiți pixeli se înjumătățesc iar cel din colțuri se "formează" din patru sferturi.



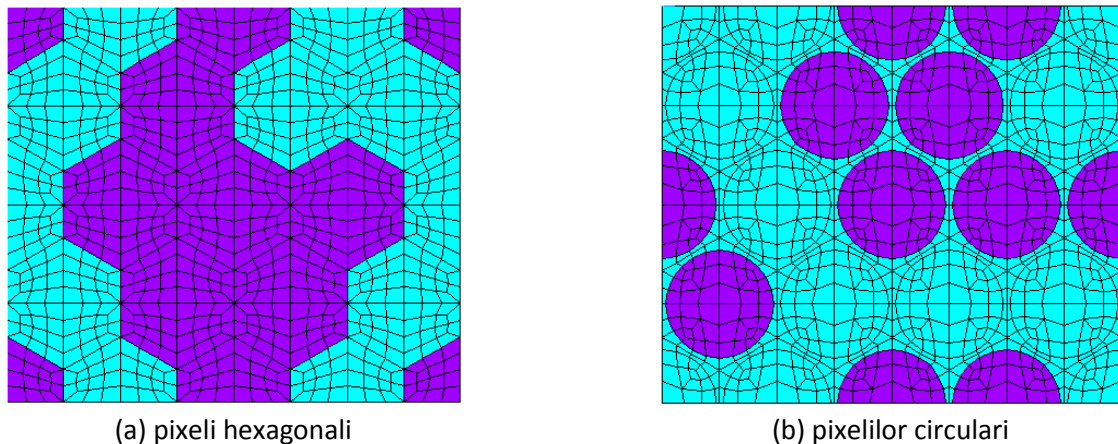
**Fig. 3.21.** RVE din Fig. 3.19,b și numerotarea pixelilor circulari.

Numărul de pixeli din fiecare material, precum și raza pixelului circular se consideră date de intrare. Raza maximă a pixelului circular se limitează în raport cu hexagonul în care se înscrie pentru a nu obține elemente finite distorsionate. Pixelul circular asigură o arie maxim posibilă de 0.90689 din aria hexagonului în care se înscrie, dar practic acest coeficient se limitează la 0.88 pentru a evita apariția elementelor distorsionate excesiv (vezi Fig. 3.22,b).

Elementele finite din componența pixelilor pot fi patrulatere cu patru noduri Q4 sau patrulatere cu opt noduri Q8. De regulă, pentru creșterea preciziei elementele Q8 sunt preferate. Discretizările inițiale cu număr minimal de elemente finite patrulatere, riguros controlate pot fi "rafinare" astfel încât fiecare element finit patrulater este împărțit în alte patru elemente finite



patrulare. Discretizări controlate au fost realizate și pentru pixelii de formă circulară dispuși după aceeași regulă (Fig. 3.22).



**Fig. 3.22.** Exemple de discretizări minimale cu elemente patrulare pentru zonele de bază.

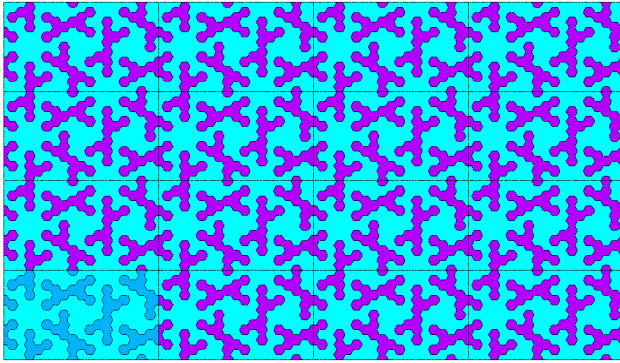
### 3.7. RVE hexagonal cu pixeli hexagonali sau circulari încadrați într-un triunghi rotit de șase ori sau cu simetrie reflexivă și rotit de trei ori

Se consideră o structură periodică 2D (Fig. 3.23) pentru care pixelii din RVE, de formă hexagonală se dispun într-un hexagon cu  $NE_x = 4$  pixeli pe fiecare latură. Fiecare pixel poate să fie teoretic din alt material, dar practic, în acest raport, din material moale sau tare. Celulele hexagonale se obțin prin rotire sau reflexie și rotirea zonei de bază așa cum se prezintă în Fig. 3.24. Deoarece condițiile la limită pe structuri periodice de formă hexagonală se aplică mai greu, se consideră RVE dreptunghiulare care practic conțin două celule hexagonale (Fig. 3.25). Regula de numerotare aleasă pentru zona de bază se prezintă în Fig. 3.26 pentru pixelii de formă hexagonală dar și circulară.

Elementele finite din componența pixelilor pot fi patrulare cu patru noduri Q4 sau patrulare cu opt noduri Q8. De regulă, pentru creșterea preciziei elementele Q8 sunt preferate. Discretizările inițiale cu număr minimal de elemente finite patrulare, riguros controlate pot fi "rafinare" (vezi Fig. 3.25,a pentru o discretizare minimală) astfel încât fiecare element finit patrular este împărțit în alte patru elemente finite patrulare. Discretizări controlate au fost realizate și pentru pixelii de formă circulară dispuși după aceeași regulă. De exemplu pentru pixeli hexagonali discretizarea minimală pe RVE conține 5832 elemente finite, iar pentru discretizarea cu pixeli circulari 9720 elemente finite. Se observă că se controlează doar 15 pixeli, și mai mult decât atât prin modul de generare ales pixelii centrali din hexagon apar o singură dată în celula hexagonală, cei din colțuri apar de două ori în timp ce restul se regăsesc de 6 ori în celula hexagonală. Acest aspect complică folosirea acestei distribuții în algoritmii de optimizare.

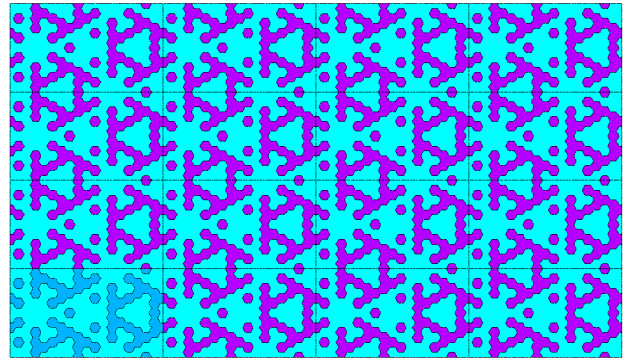
Numărul de pixeli din fiecare material, precum și raza pixelului circular se consideră date de intrare. Raza maximă a pixelului circular se limitează în raport cu triunghiul în care se înscrie pentru a nu obține elemente finite distorsionate. Pixelul circular asigură o arie maxim posibilă de 0.90689 din aria hexagonului în care se înscrie, dar practic acest coeficient se limitează la 0.88.

Pentru distribuția particulară (culorile pixelilor) considerată în zona de bază din Fig. 3.14,b în cele două variante de generare rezultă structurile periodice cu pixeli circulari din Fig. 3.15 care "seamănă" cu cele din Fig. 3.11.



RVE

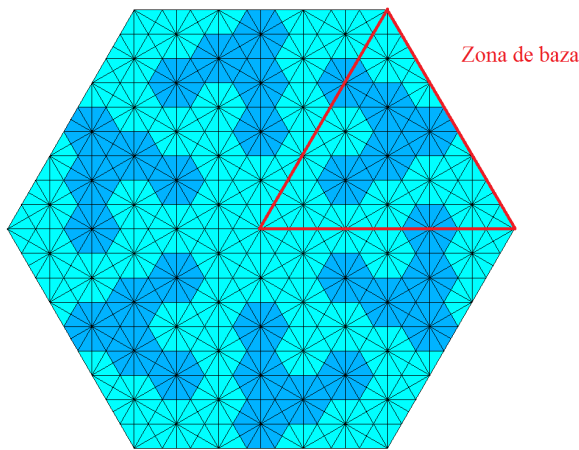
(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de șase ori a triunghiului de bază



RVE

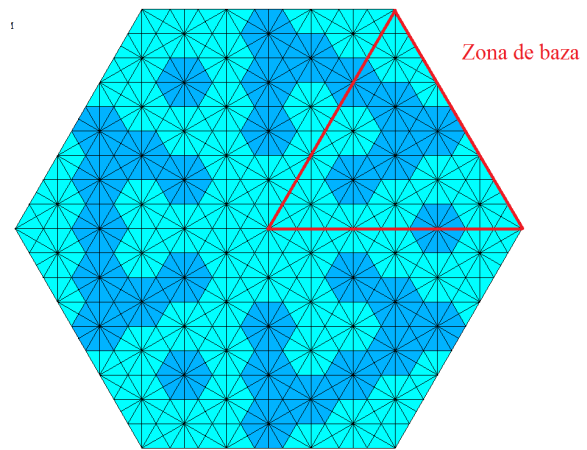
(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de trei ori a triunghiului de bază reflectat

**Fig. 3.23.** Structuri periodice formate din RVE generate din structuri hexagonale obținute prin rotirea unui triunghi sau reflexia și rotirea unui triunghi de bază cu pixeli triunghiulari. Fiecare pixel poate fi dintr-un material omogen cu proprietăți specificate. Culori diferite corespund la materiale cu proprietăți diferite. Reprezentarea de față include pixeli din două materiale.



Zona de baza

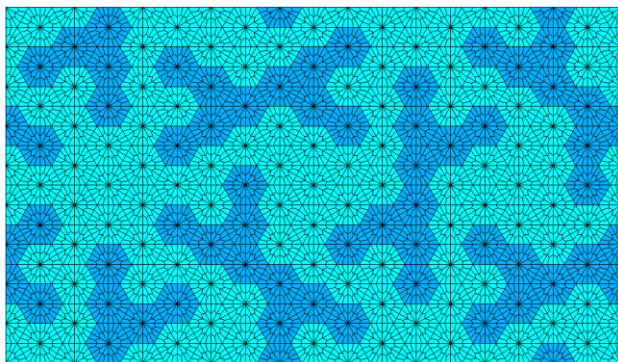
(a) Zona de bază rotită de 6 ori cu  $60^\circ$  (simetrie ciclică)



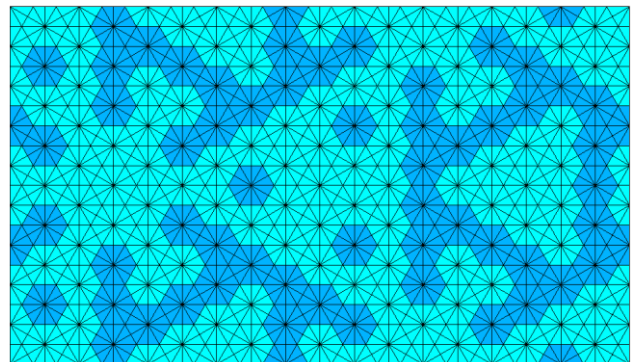
Zona de baza

(b) Zona de bază reflectată și apoi rotită de 3 ori cu  $120^\circ$  (simetrie reflexivă și ciclică)

**Fig. 3.24.** Celula hexagonală cu pixeli hexagonali



(a) simetrie ciclică



(b) simetrie reflexivă și ciclică

**Fig. 3.25.** RVE obținute din ariile complete a două celule hexagonale prezentate în Fig. 3.24.

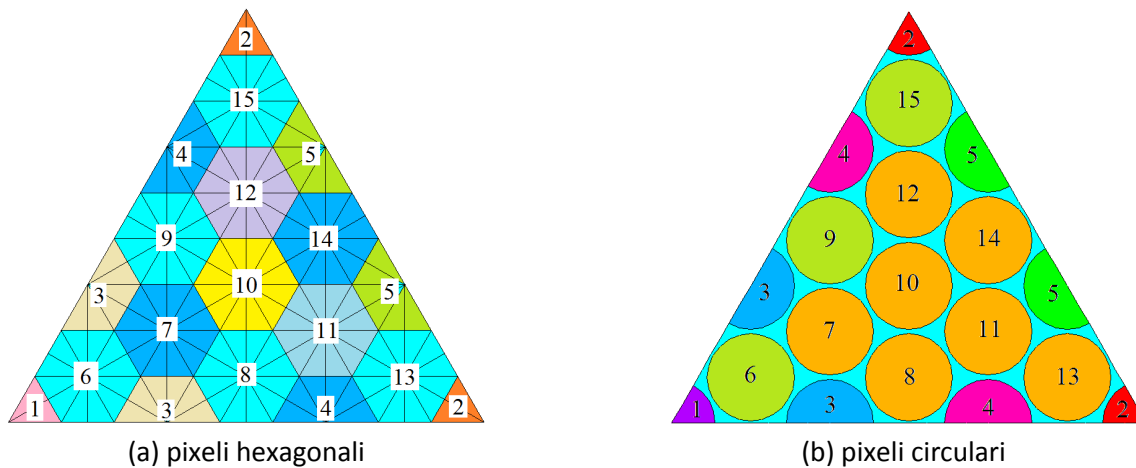
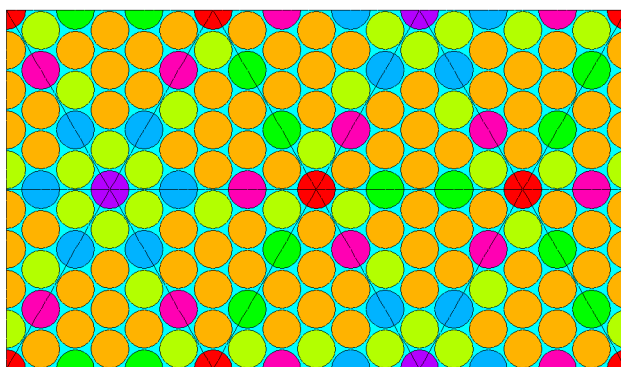
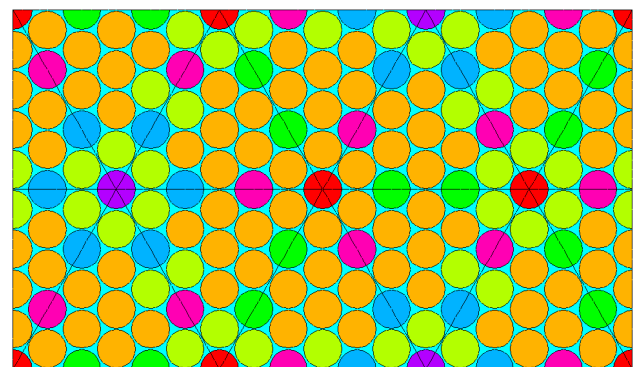


Fig. 3.26. Numerotarea pixelilor din zona de bază.



(a) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de șase ori a triunghiului de bază



(b) Celule hexagonale periodice obținute prin rotirea de trei ori a triunghiului de bază reflectat

Fig. 3.27. RVE obținute din structuri hexagonale cu pixeli circulari pentru distribuția de materiale (culori diferite) din triunghiul de bază prezentat în Fig. 3.26,b.

#### 4. Încercarea mecanică a materialelor cu microstructuri eterogene având microstructura stocastică modificată ca referință a eșantioanelor prototipate 3D

##### (Activitatea 3.4)

##### 4.1. Îmbunătățirea sistemului de testare.

Sistemul de testare a fost îmbunătățit pe două planuri. Unul constructiv, astfel încât cadrul sistemului a fost realizat din profile de aluminiu, acestea fiind mult mai rigide decât cele ale sistemului folosit în etapa anterioară a proiectului. Totodată s-au introdus două lagăre noi la jumătatea cadrului pentru da o mai bună stabilitate în plan vertical a sistemului de acționare. În Fig. 4.1 este prezentat noul cadru de aluminiu al sistemului de testare.





**Fig. 4.1.** Noul cadru de aluminiu al sistemului de testare.

În al doilea rând, elementele electronice din componența sistemului de încărcare au fost amplasate într-o carcasă de aluminiu. În Fig. 4.2 este prezentată cutia de comandă a sistemului cu capacul demontat pentru a se vizualiza componentele interne.



**Fig. 4.2.** Cutia cu componentele de comandă a echipamentului de testat.

#### **4.2. Epruvetele testate**

În Tabelul 4.1 este prezentată codificarea epruvetelor turnate testate. Raportul stoichiometric este modificat pentru a se urmări influența conținutului suplimentar de rășină în comparație cu cel de întăritor. Raportul normal, recomandat de bto-epoxy din Austria (partener în proiect) este de 1:2,75 (întăritor:rășină). Astfel raportul 1:3 (o parte întăritor – notat apoi H și trei părți rășină – notat apoi R) este foarte apropiat de cel normal, iar rapoartele 1:4 și 1:5 sunt rapoarte sub-stoichiometrice. Comportarea epruvetelor pentru aceste rapoarte ar trebui să fie mai ductilă, în același timp scăzând rezistența la rupere (rezistența) și modulul de elasticitate longitudinal (rigiditatea).

**Tabelul 4.1.** Codificarea epruvetelor testate la tracțiune.

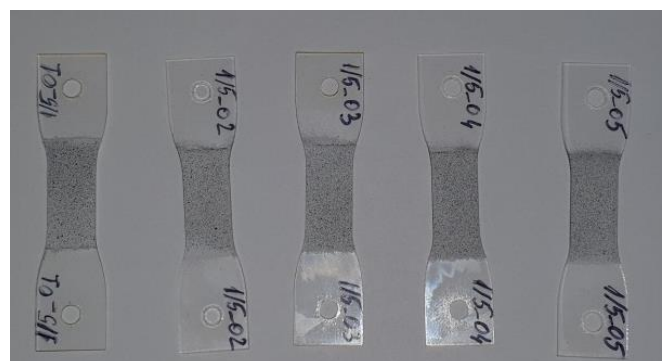
Denumire epruvetă	Raport stoichiometric	Codificare
R4T – N57B	1:3	N57B_0#
R4T – N58B	1:4	N58B_0#
R4T – N59B	1:5	N59B_0#
# numărul epruvetei încercată la tracțiune		

Pentru analiza ruperii epruvetelor la tracțiune s-a folosit, ca și în etapa precedent, metoda corelării digitale a imaginii (digital image correlation – DIC), printr-o vizualizare a deformării epruvetelor sub microscop. Grosimea epruvetelor turnate este de 0,5 mm egală cu a celor realizate până în prezent prin tipărire, dimensiunile fiind descrise în capitolul 6. S-a prelevat un set de cinci epruvete din fiecare lot în parte, rezultând astfel un total de 15 epruvete.

Condițiile de testare cu sistemul ISTR A 4D microDIC au fost :

- Viteza de încărcare: 1 mm/min;
- Forța maximă în jurul valorilor de 200-250 N;
- Frecvența de achiziție a datelor: 1 Hz;
- Dimensiunile fațetelor în analiza câmpului de deformații: 55x55 pixeli;
- Distanța între mijlocul fațetelor în analiza câmpului de deformații: 53 pixeli, pentru a asigura o mai bună suprapunere a fațetelor.

În Fig. 4.3 sunt prezentate spre exemplificare cele cinci epruvete din sistemul R4T – N59B, pregătite spre a fi testate prin vopsirea suprafeței cu un fond de vopsea alba și apoi pulverizarea unor stropi de vopsea neagră de dimensiuni cât mai mici.



**Fig. 4.3.** Epruvetele sistemului R4T – N59B.

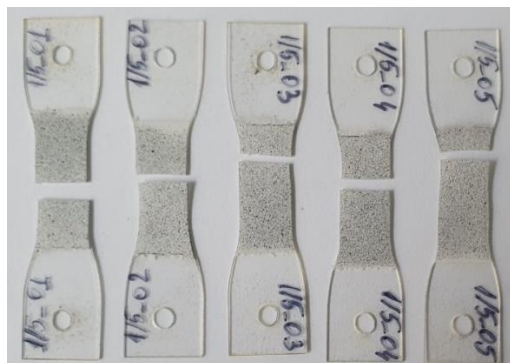
Epruvetele testate sunt prezentate în Fig. 4.4 – Fig. 4.6.



**Fig. 4.4.** Epruvetele testate R4T – N57B.



**Fig. 4.5.** Epruvetele testate R4T – N58B.



**Fig. 4.6.** Epruvetele testate R4T – N59B.

Curbele caracteristice rezultate în urma încercărilor la tracțiune sunt prezentate în figurile următoare (Fig. 4.7-Fig. 4.9); de asemenea a fost reprezentată și valoarea medie pentru fiecare set de epruvete încercate.

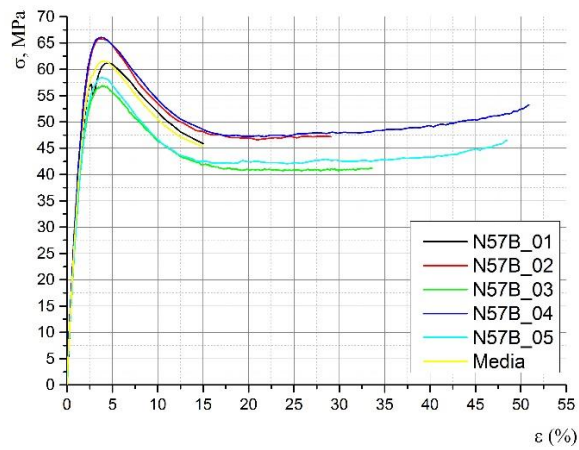


Fig. 4.7. Curbele caracteristice pentru epruvetele N57B.

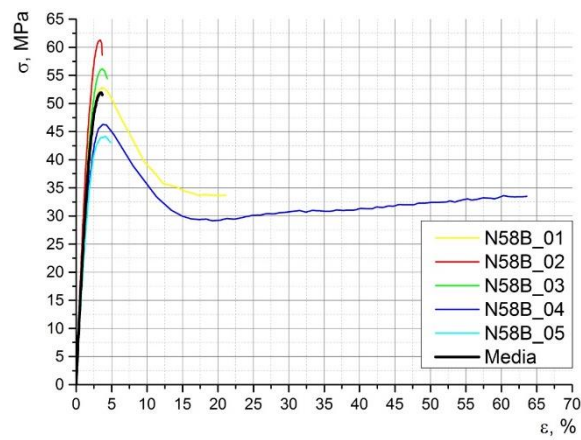


Fig. 4.8. Curbele caracteristice pentru epruvetele N58B.

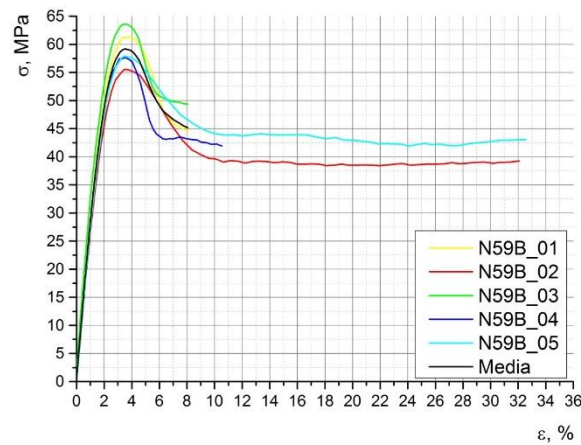


Fig. 4.9. Curbele caracteristice pentru epruvetele N59B.

## Diseminare rezultate

În cadrul proiectului, în etapa 2 din anul 2021, s-a realizat participarea la conferința *Virtual 4th International Conference on Structural Integrity ICSI2021*, organizată de Universitatea din Porto, care a avut loc online în perioada 30.08-02.09.2021. Au fost prezentate atunci două lucrări, publicate ulterior în *Procedia Structural Integrity*, indexată ca proceedings WOS, cu acknowledgement la proiect:

- 1) Coropețchi Iulian, Vasile Alexandru, Sorohan Ștefan, Picu Cătălin Radu, Constantinescu Dan Mihai, *Stiffness Optimization Through a Modified Greedy Algorithm*, *Procedia Structural Integrity*, 37, 755-762, 2022
- 2) Vasile Alexandru, Coropețchi Iulian, Sorohan Ștefan, Picu Cătălin Radu, Constantinescu Dan Mihai, *A Simulated Annealing Algorithm for Stiffness Optimization*, *Procedia Structural Integrity*, 37, 857-864, 2022

La fiecare dintre cele două articole, primii doi autori sunt doctoranzi și membri în echipa de cercetare.

A fost prezentată o lucrare oral pe baza încercărilor experimentale realizate de UPB la conferința internațională *4th International Conference on Materials Design and Applications 2022 (MDA 2022)* organizată de universitatea din Porto în perioada 7-8 iulie 2022.

Au mai fost prezentate două lucrări oral cu determinările experimentale și numerice obținute în cadrul etapei din acest an la *11th European Solid Mechanics Conference (ESMC 2022)*, Galway, Ireland, în perioada 4th – 8th July, 2022. Conferința a fost organizată de National University of Ireland, Galway. La conferință au fost 1100 participanți.

O altă lucrare cu rezultatele numerice obținute în cadrul etapei a fost prezentată ca poster la *38th Danubia-Adria Symposium on Advances in Experimental Mechanics (DAS 38)*, Poros, Grecia, în perioada 20– 23 septembrie, 2022. Lucrarea va fi publicată în *Materials Today – Proceedings*, indexată WOS.

O ultimă lucrare a fost prezentată tot ca poster la *6th International Conference on Design and Technologies for Polymeric and Composite Products (POLCOM 2022)*, organizată în UPB în perioada 23-26 noiembrie 2022. Lucrarea este în curs de recenzie și va apărea în revista *Macromolecul Symposia*, editată de Wiley cu factor de impact 0,913 în 2021.

Din echipa de cercetare au fost implicate în activitățile de cercetare din această etapă trei persoane sub 35 ani, dintre care doi doctoranzi în stagiul.

## Concluzii

Simulările numerice prezentate în primele trei capitole ale raportului tehnic au avut în vedere dezvoltări ale unor algoritmi specifici pentru a arăta care ar fi distribuțiile de materiale care ar duce la obținerea unor proprietăți mecanice cvasi-omogene pentru materialul tipărit. Diferitele variante de raport stoichiometric dintre rășină și întăritor simulate numeric în primul capitol pot fi reproduse prin tipărirea aditivă a diferitelor eșantioane de polimer termorigid.

Implementarea modelului a fost costisitoare, necesitând un efort de documentare considerabil, dar rezultatele obținute precum și cele prezentate în acest raport sunt realiste și efectul distribuției materialului conform modelului implementat duce la concluzii importante. Trebuie menționat că UPB este singurul partener din consorțiu care realizează simulări numerice.

Codul Ansys APDL a fost implementat și validat parțial (Anexele 1 și 2 sunt atașate la raportul științific și tehnic) pentru o serie de cazuri simple considerându-se funcții obiectiv de testare propuse și poate fi folosit în continuare pentru a introduce alte funcții de optimizare judicios alese. Deocamdată s-a urmărit în special partea de implementare și validare parțială.

Dat fiind modul de realizare experimentală a tipăririi aditive, prin picurarea rășinii, în modelele numerice utilizate în capitolul 2 (activitatea 3.2) se consideră pixeli de formă circulară, formați din două materiale diferite. Optimizarea secvenței rețelelor tipărite se face pentru soluțiile căutate (minimumul sau maximumul modulului de elasticitate) și conduce la optime care corespund în totalitate cu cele știute în urma modelării cu elemente patrulatere. Criteriul de izotropizare conduce la variante interesante ale distribuțiilor de material, unele sunt dintre cele cunoscute pentru izotropia transversală (bazate pe zone așezate hexagonal). Tot în acest capitol se face extinderea pentru modelarea 3D și, mai important, optimizare de tip FGM (Functional Graded Material). Acest tip de optimizare poate fi folosit pentru uniformizarea unei mărimi locale într-un model cu geometrie și încărcări impuse folosind MEF.

Capitolul 3 (activitatea 3.3) urmărește ca rezultat dezvoltarea numerică a algoritmilor de optimizare în funcție de proprietățile dorite ale eșantioanelor tipărite ca structuri periodice, astfel încât s-au imaginat *zece variante de distribuție predefinită (patern)* a materialului *tare* și *moale* în diverse RVE pentru care condițiile de simetrie reflexivă, care reduc modelul de calcul, nu mai sunt necesare. Cele zece variante de RVE analizate pentru a obține structuri periodice care să satisfacă diverse cerințe au fost implementate și rulate în Ansys APDL în domeniul liniar elastic pentru extragerea completă a matricelor de rigiditate în formă omogenizată pentru spații de proiectare cu 16 pixeli de diferite forme (pătrat, romb, hexagonal, cerc). Pentru a elimina dependența rezultatelor de finețea discretizării (în special pentru modele în care fiecare pixel dreptunghiular era discretizat într-un singur element finit) s-au efectuat analize de convergență și s-au ales discretizări mai fine adaptate fiecărui caz în parte. S-a constatat că pixelii de formă circulară sunt mai puțin sensibili la finețea discretizării și din acest motiv șapte din variantele de alegere a RVE au fost dublate de folosirea pixelilor circulari, deși în acest fel fracția volumică a materialului tare se reduce ușor deoarece s-a considerat că între pixelii circulari din material *tare* se dispune material *moale*. S-au analizat toate posibilitățile de alegere a fracțiilor volumice pentru toate RVE analizate, rezultând astfel un număr foarte mare de realizări care poate fi folosit într-un algoritm de tip *machine learning*.

Capitolul 4, dedicat încercărilor experimentale, urmărește caracterizarea mecanică a proprietăților materialelor turnate din cerneluri reactive, cu raport stoichiometric normal (indicat de partenerul din proiect care fabrică sistemul polimeric) și alte două loturi de material cu rapoarte sub-stoichiometrice. Astfel s-a constatat că sistemele polimerice N58B și N59B, având raport sub-stoichiometric, au rezistența la rupere medie mai mică, dar influența modificării raportului sub-stoichiometric nu este clară, respectiv pentru cel mai mic raport sub-stoichiometric - 1:5 pentru N59B - rezistența la rupere nu este mai mică decât cea obținută pentru sistemul N58B cu raportul sub-stoichiometric intermediar de 1:4. Alungirea la rupere are pentru cele trei tipuri de epruvete un coeficient de variație foarte mare, cel mai mic fiind pentru N57B, cu raport stoichiometric normal, epruvete pentru care se obține și cea mai mare alungire medie la rupere de 36%; pentru celelalte două tipuri de epruvete nu numai că alungirea la rupere scade la jumătate, dar și coeficientul de variație este foarte mare. Este cel mai probabil că diferite goluri și defecte locale au dus la ruperea prematură a acestor epruvete.

În capitolul 5 se prezintă capacitatea metodei de imprimare 3D, stabilită de partenerii din Austria, de a produce materiale polimerice termorigide eterogene și de a evalua efectul modulației spațiale a stoichiometriei asupra comportamentului global al materialului. Rezultatele încercărilor mecanice furnizate de UPB și cele de caracterizare a proprietăților la uzură și stabilitate termică furnizate de INCAS au făcut posibilă definirea a patru tipuri de materiale. La aceste variante de tipărire s-a ajuns după multe încercări de a modifica parametrii tehnologici ai procesului de tipărire. S-au stabilit în final patru configurații de tipărire aditivă cu cerneluri reactive, notate P1-P4 prezentate în acest capitol.

Ultimulele loturi de materiale tipărite testate experimental (capitolul 6 activitatea 3.6) au avut 60 de straturi, respectiv o grosime totală a succesiunii straturilor de aproape 3 mm și urmăresc variantele de tipărire stabilite în capitolul anterior. Din păcate materialele livrate nu au fost în cantitate suficientă, iar unele dintre eșantioane au fost deformată către capetele eșantioanelor datorită efectelor termice rezultate după tipărire. Rezultatele prezentate în capitolul 6 arată că cea mai bună comportare au avut-o epruvetele cu gradient de tipărire pe grosime în afara planului (numit out) din eșantionul N53B, chiar dacă încercările au fost făcute numai pe direcție transversală T – deformația specifică de 2% fiind puțin mai mare și decât cea obținută pentru eșantionul N52B la care tipărire s-a făcut pe ambele direcții cu secvența Y/Y-Y/X-Y/Y-Y/X, strat după strat, grosimea fiecărui strat fiind de 500 μm.

Întregul set de rezultatele numerice și experimentale obținute ne dau încredere în posibilitatea atingerii scopului de a tipări materiale cvasi-omogene cu proprietăți comparabile cu ale materialelor turnate. Rolul simulărilor numerice și a optimizărilor pe care le-am efectuat este de a îmbunătăți modalitățile de tipărire a materialelor prin controlul microstructurii în timpul procesului de tipărire. Cu alte cuvinte, distribuția rășinii și a întăritorului și ulterior a unor nanoparticule silica se va face în continuare controlat, pe baza rezultatelor obținute prin simulări numerice și apoi prin determinarea comportării mecanice a acestor materiale prin încercări experimentale.