

多尺度模拟帮助 3D 打印虚拟材料设计取得突破

荷兰应用科学研究院 (TNO) 的研究人员正利用多物理场仿真、多尺度模拟和拓扑优化来研究多材料 3D 打印。

作者: LEXI CARVER

近年来, 3D 打印 (增材制造) 已经成为了研究、设计和制造工作中的一个重要组成部分。现在, 这项技术在材料设计领域也显示出了良好的应用前景。

不久之后, 利用多种材料来打印一个具有渐变属性的物体将变得十分常见, 这项功能可实现相当丰富的新应用, 例如拥有高度定制化材料属性的集成产品。

增材制造经常会使用带有重复性图形的小型周期性微结构来制作形状。单个微结构称作一个晶胞, 可以是简单的三角形或蜂窝形, 或者更为复杂的壁面间有横向支柱和多个孔隙的结构。3D 打印技术近期正在飞速发展, 其中包括允许在微观层级进行多材料打印这一功能, 设计人员可根据需要对这些微结构进行组合和定制。这类精细控制使工程师们可以选择每种所用材料的比例和排列, 从而能够更加灵活和自由地“设计”性能, 这是单种材料所无法实现的。

在荷兰应用科学研究院 (TNO), 研究人员已经开始利用多物理场仿真和多尺度模拟来分析虚拟材料设计, 以确定如何在 3D 打印对象中有效反映出特定属性。研究院的工作涉及多个领域, 包括安全与安保、能源, 以及制造, 他们已经将用于优化 3D 打印设计中材料和

拓扑的技术拓展到了其他研究领域, 例如轻量级的机电一体化技术、任意形状的太阳能电池, 以及照明产品等。

→ 各向异性材料中的应力、应变和刚度

各向异性材料的行为会因所施加载荷的方向不同而存在差异; 但在当前的材料生产方法中, 对各向异性的控制相当有限。因此, 我们难以在产品设计中利用它的各项优势。

Marco Barink 是 TNO 的一名研究人员, 正使用刚度和拓扑优化技术来为可制造各向异性结构开发设计流程。最初他使用 COMSOL Multiphysics® 软件来分析单个晶胞, 希望该晶胞在一个平面方向上的刚度达到另一个方向的两倍 (见图 1)。“我们当时的目标是一个想要达到的刚度矩阵, 因此我们在 COMSOL 中施加了一个应变, 然后进行优化以找出所需的应力。”他解释说: “我们可以指示 COMSOL 将材料一个方向的刚度设计为另一个方向的两倍, 然后分析给定几何下的材料行为。”他在一个用于测试预期材料行为的打印样品上验证了仿真结果。在确定了仿真结果的准确性之后, 他对一个具有高度各向异性的材料进行了二次优化研究。此时, 仿真不仅可以控制材料的

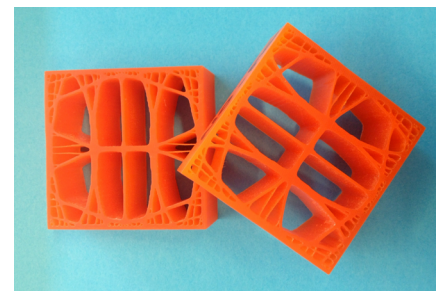
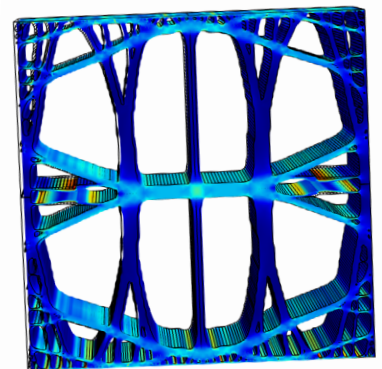
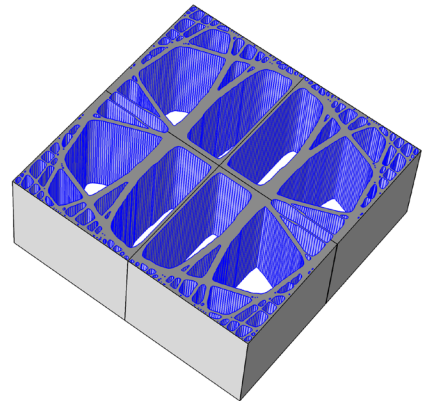


图 1. 上: 晶胞几何。中: 仿真结果显示了一个优化设计中的机械应力, 其中某个平面方向的刚度仅为另一个方向的一半。下: 3D 打印样品。

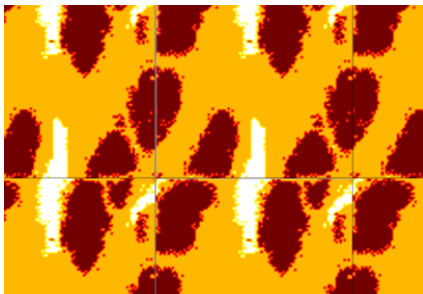


图 2. Barink 的仿真结果显示了用于实现所需各向异性热导系数的最优材料组成（三种材料）。仿真显示了高导热（白色）、低导热（橙色），以及非导热材料和空隙（红色）区域。若干晶胞呈周期性排列。

空间分布，还可以控制各向异性纤维的取向。

在设计出单种材料所无法提供的属性这一更大目标下，下一步是将仿真拓展到由不同材料组成的结构中，或称多材料。Barink 在 COMSOL 中定义了一个各向异性多材料单元，然后在由这些单元组成的整体样式结构中优化了每种材料的局部分布（见图 2）。他使用软件来调整成分和单元排列，直到实现所需的整体导热率。

→ 多尺度模拟和计算均匀化

在现实中，每个晶胞都将构成最终成品中一个微小的区域。在微观级别实现优化后，TNO 团队又开始研究更大尺度器件中的材料优化。“我们发现这种微尺度策略适用于相对较小的体积。”TNO 的研究工程师 Erica Coenen 说道：“但在设计实际生活产品时，需要在可行的计算时间内满足需求地成比例放大。这就是可以用到被称为多尺度模拟的地方，它为设计人员提供了一个可以同时有效模拟微材料尺度到产品尺度的工具。”

Coenen 通过 COMSOL 中的工具提取了在单个多材料单元中实现等效结构行为的相关参数。这一等效行为被用于

整个器件的全尺度模型，或称宏观模型中。“我们成功创建了一个全耦合的多尺度仿真，宏观模型在不涉及子结构细节的情况下包含了均匀属性，而微观模型则包括了非均匀多材料微结构。一个宏观模型内有多个微观模型在运行。”她解释说：“我们可以一次考察多个微观模型，并基于宏观模型的局部条件来求解高度非线性和依赖于温度的行为。”

在 TNO 的多个主要研究课题中，Coenen 和 Barink 选择了其中一个来应用此方法的简化版，即开发大型柔性有机发光二极管（OLED），其中需要在柔性基底上沉积有机半导体。为了实现较好的光均匀度，需要仔细设计用于器件前端透明电极的金属格栅；光输出的可见差异会造成较亮和较暗的区域，这是我们在最终产品中所不希望看到的。

但是含有金属格栅的 OLED 中，不同组件的尺寸差异很大，在过去，要对它直接模拟非常困难。构成格栅的蜂窝形状有几毫米宽，但它们的金属边缘只有 10–100 微米厚，再加上更大的有数十厘米宽的完整 OLED 背景，我们很难在一个模型中包括所有这些不同的长度

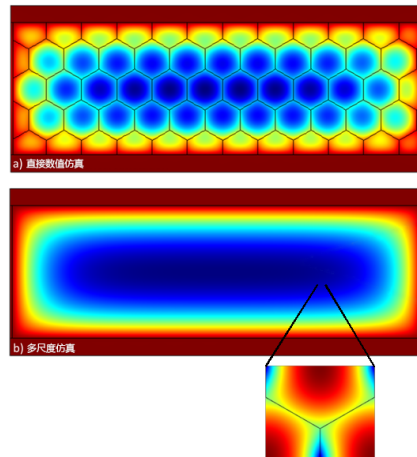


图 3. COMSOL® 软件中的仿真结果显示了 OLED 的光输出。顶部：包含六边形网格的模型。底部：带有均匀材料属性的宏观模型。

尺度。

“多尺度模拟才是我们真正的发展方向。”Barink 评价道。在一项新的 COMSOL 研究中，他们分析了格栅形状以确定用于改进光分布的理想布局。在结合了完整 OLED 的宏观模型和蜂窝格栅的微观模型之后，他们求解了有效光输出，并优化了间距和蜂窝尺寸（见图 3）。现有设计得到了更新，在不影响 OLED 效率的同时，均匀性提升了 12%。

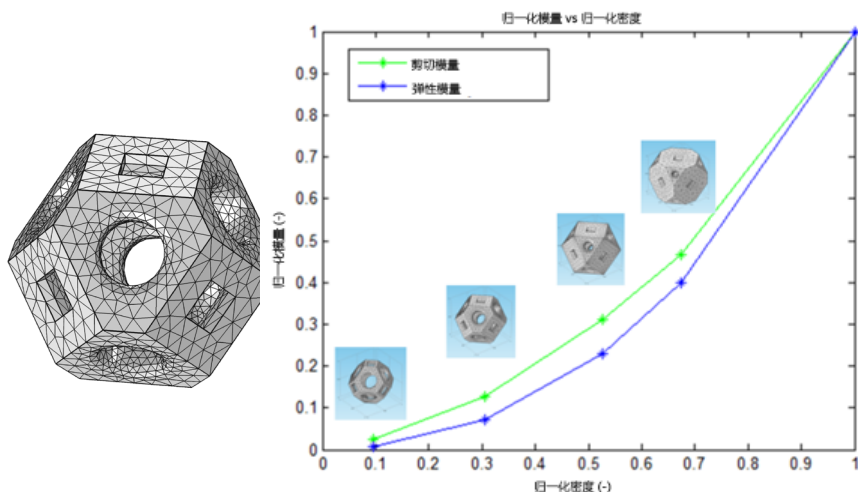


图 4. 左：用于优化金属 3D 打印的晶胞模型（已剖分网格）。右：不同晶胞设计的均匀材料属性总览。

→ 全部结合在一起：从单晶胞到完整零件

Coenen 和 Barink 已经演示了拓扑优化是一项生成增材制造设计的强大工具，因为它可以开发出一些无法通过传统技术制造的产品。但即使是这样灵活的制造技术也存在一些局限。在一种称作选择性激光熔化成形 (SLM) 的 3D 打印技术中，打印机会将粉末层熔化为所需的形状。之后必须移除对象上未使用的粉末，SLM 设计中通常会避免使用大的悬臂，因为它会发生弯曲。这里就存在一个潜在冲突：当经拓扑优化创建的理想设计中包含封闭孔隙或大的悬臂时会发生什么？

“为了规避这个问题，我们的工程师提出了几种不同密度的晶胞。” Barink 评论道：“这些晶胞被设计为具有刚度，支持打印，并包含孔洞以便移除粉末。不同的晶胞被结合起来生成所需的整体属性。”他们使用 COMSOL 分析了材料密度和机械刚度之间的关系（见图 4）。

从器件级别来看，我们无法处理一个包含数千个小型 3D 晶胞的模型，因此他们结合了所有测试技巧：在每类晶胞中进行刚度均化，同时在更大级别上进行拓扑优化。“在器件级别的拓扑优化中，每个晶胞的均匀属性被处理为单独的材料。” Barink 继续说道。

他们在聚合物锤柄的具体示例中应用了完整的工艺（见图 5），它的制造成本要低于金属打印。最终设计包含不同晶胞类型的组合，并通过软件进行了优化，从而能在维持正确刚度的前提下尽量减少材料的使用。“锤柄制造中演示了整套工艺在从设计到最终成品中所能发挥的巨大功能和多样性。” Barink 说道：“从晶胞设计、均匀化、拓扑优化、生成打印输入，到最终打印，我们开发了一项非常好的技术，可用于设计包含所有微观特征的完整器件。当应用

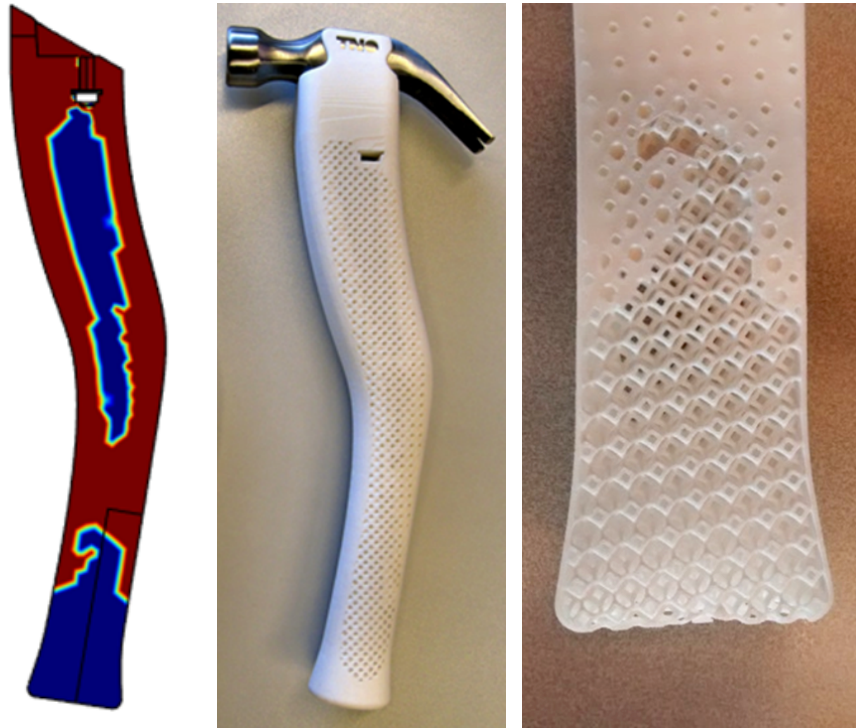
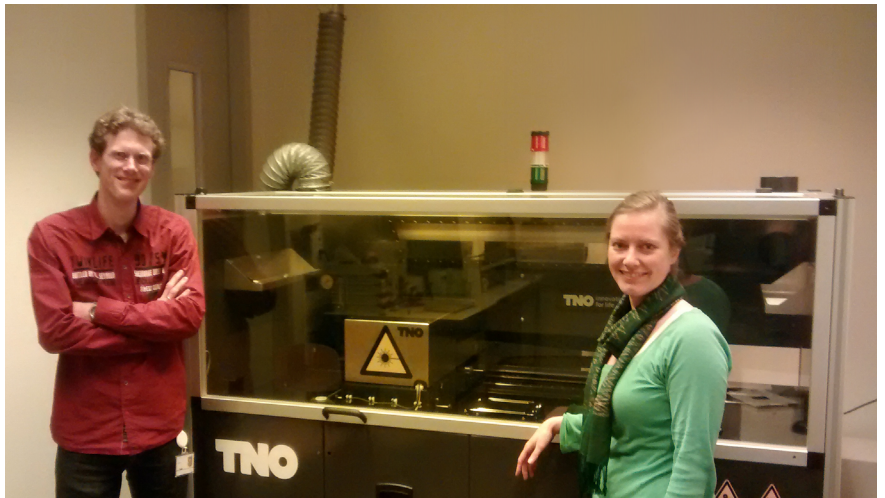


图 5. 左：COMSOL® 软件中的拓扑优化结果。中：优化的锤柄，通过尼龙打印。右：包含 3 种不同晶胞类型样式的放大图：靠近顶部处带有小孔的晶胞分布最密，底部的晶胞分布最为稀疏，中间会有一些过渡形状。

于 SLM 设计时，该技术可解决金属打印中所面临的典型生产问题，从而设计出更强大、更高科技的产品。”

TNO 的团队从单个晶胞开始，已经成功开发出了具有各向异性的多材料微结构。他们将该技术应用于 TNO 的多

个研究领域，演示了仿真与多尺度模拟的结合能在创新产品的开发中发挥巨大作用。这也使我们得以窥见未来，那时多材料设计将成为一种常见的增材制造方法，如果没有仿真，所有这一切都将无法实现。❖



Marco Barink（左）和 Erica Coenen（右）站在 TNO 的 3D 打印机前。