

На правах рукописи



Герасимов Олег Владимирович

**Моделирование деформирования образцов из
неоднородных материалов по данным компьютерной
томографии**

Специальность 1.1.8. — Механика деформируемого твёрдого тела

Автореферат диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Казань — 2024

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

Научный руководитель: **Саченков Оскар Александрович**, кандидат физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», заведующий кафедрой компьютерной математики и информатики

Официальные оппоненты: **Кучумов Алексей Геннадьевич**, доктор физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», профессор кафедры вычислительной математики, механики и биомеханики

Гаврюшин Сергей Сергеевич, доктор технических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана (национальный исследовательский университет)», заведующий кафедрой компьютерных систем автоматизации производства

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

Защита состоится «9» октября 2024 г. в 16.00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.327.07 при ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» по адресу: 125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» по адресу: 125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4 и на сайте: mai.ru/events/defence/?ELEMENT_ID=178377.

Телефон для справок: +7 (499) 158-48-29

Автореферат разослан «___» _____ 2024 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Сердюк Д.О.

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Развитие технологии производства композитных материалов предполагает как совершенствование процесса создания конструкций (Fu et al., 2019), так и усложнение проводимых расчётов (Kasiviswanathan et al., 2015; Vilchevskaya et al., 2015). Основным направлением оказывается разработка методов описания параметров вычислительных моделей и применение их для прогнозирования поведения объектов под действием внешних нагрузок (Zhao et al., 2016; Каюмов et al., 2018; Galati et al., 2021). Валидация методов выполняется на основе результатов проведения натуральных экспериментов, что в большинстве случаев оказывается трудоёмким и дорогостоящим процессом. Развитие получили подходы, основанные на построении численных моделей по данным с цифрового двойника (MacDonald, 2019; Sause, 2016; Gholizadeh, 2016), построенного на основе изображений исследуемых объектов. Численные методы, предполагающие построение цифрового двойника, называются методами неразрушающего контроля и позволяют проводить моделирование с учётом распределения структурных и прочностных особенностей материала (Karabutov et al., 2018; Wang et al., 2020; Kurta et al., 2009). Одним из способов получения изображений выступает проведение рентгеновской компьютерной томографии, предполагающее восстановление распределения проницаемости среды в заданном объёме (Jia et al., 2014). В настоящее время одним из основных подходов к моделированию образцов на основе данных с изображений выступает гомогенизация исследуемой области (Simon et al., 2022; Kichenko et al., 2011; Kharin et al., 2019; Каюмов et al., 2018; Carniel et al., 2019). В данной работе рассматривается новый численный метод, основанный на методе прямого учёта механических свойств среды по данным с изображений.

Исследования, направленные на изучение методов моделирования образцов из негомогенных материалов, проводятся зарубежными и отечественными учёными: А.А. Карабутов, В.П. Фандеев, Т.Н. Чикова, А.А. Киченко, А.Ф. Федотов, Л.Б. Маслов, Р.А. Каюмов, А.Ю. Акулич, Ю.В. Акулич, А.С. Денисов, И.Ф. Ахтямов, М.В. Банецкий, Н.В. Дедух, Д.М. Пошелок, С.В. Малышкина, В.М. Тверье, Т.В. Колмакова, В.Н. Никитин, Ю.И. Няшин, А.С. Lewis, G. Legrain, R. Paul, G. Maquer, Z.L. Wang, S.C. Cowin, P. Marcian, D. Ulrich, N. Moes, K. Grassie, Y. Khan, S. Gupta, P. Dan, B. Wang, D. Ambrosi, N. Zhang, J. Rice, J. Bowman, A. Sas, A. Sermon, G.H. van Lenthe, C.H. Turner, M. Ruess, K. Becker, Ph.K. Zysset и прочими.

Целью данной работы является разработка метода расчёта и оценки напряжённо-деформированного состояния по данным компьютерной томографии образцов из негомогенных материалов, находящихся под действием внешних нагрузок.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Исследовать актуальные на данный момент времени методы численного моделирования образцов из негомогенных материалов, находящихся под действием внешних нагрузок.
2. Модифицировать определяющие соотношения и применить их при построении конечного элемента, способного учитывать распределение свойств материала по данным с изображений.
3. Разработать метод восстановления расчётной геометрии образца на основе данных о пространственном распределении материала.
4. Выполнить программную реализацию метода статического расчёта по данным компьютерной томографии образцов из негомогенных материалов.
5. Определить степень соответствия полученного представленным методом решения результатам проведения натурных испытаний.
6. Разработать методику оценки упругих констант негомогенных материалов на основе результатов проведения вычислительных и натурных экспериментов.

Научная новизна:

1. Сформулирован и реализован новый метод расчёта по данным компьютерной томографии образцов из негомогенных материалов, позволяющий прогнозировать деформирование тел и проводить оценку их напряжённого состояния при внешних нагрузках.
2. Получены основные математические соотношения, определяющие взвешенное интегрирование локальной матрицы жёсткости.
3. Предложена и реализована новая методика восстановления расчётной геометрии образцов на основе учёта пространственного распределения материала по данным с изображений.
4. Разработан алгоритм и его программная реализация для расчёта образцов из негомогенных материалов методом конечных элементов на основе данных компьютерной томографии.
5. Получены новые результаты решения задач вычислительной механики деформируемого твёрдого тела, полученные на основе применения данных с изображений.
6. Разработана и реализована методика оценки упругих констант негомогенных материалов на основе результатов проведения вычислительных и натурных экспериментов.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая составляющая результатов диссертационной работы заключается в следующем:

1. Показана состоятельность представленного метода численного моделирования при решении задач вычислительной механики деформируемого твёрдого тела на основе данных с изображений образцов из негомогенных материалов: выполнена валидация

- подхода, основанная на сопоставительном анализе полученного решения и результатов проведения натуральных экспериментов.
2. Обоснован более высокий уровень технологической составляющей представленного метода на этапе проведения вычислительных экспериментов по сравнению с существующими на данный момент времени аналогичными подходами.
 3. Установлено преимущество применения разработанного метода к численному моделированию образцов из негомогенных материалов с уникальной геометрией и неоднородной структурой.

Практическая составляющая результатов диссертационной работы заключается в следующем:

1. Разработанный метод численного моделирования позволяет прогнозировать поведение образцов из негомогенных материалов, находящихся под действием внешних нагрузок, и определять их напряжённо-деформированное состояние с учётом пространственного распределения свойств материала, полученного на основе данных с изображений. Подход позволяет проводить статический расчёт материалов с неоднородной структурой, на основе которых могут быть выполнены композитные конструкции или образованы объекты биологического происхождения.
2. Предложенный метод восстановления расчётной геометрии образца на основе пространственного распределения материала позволяет в полуавтоматическом режиме выполнять сегментацию выделенного объёма с заданной точностью. Реализация такого подхода может быть применена при расчёте образцов костных органов в клинической практике.
3. Представленный метод оценки упругих констант негомогенных материалов позволяет проводить расчёты на основе совместного применения данных вычислительных и натуральных экспериментов и может быть использован при исследовании образцов неоднородной структуры для определения механических свойств образующей ткани.

Методология и методы исследования. Для решения поставленных задач в диссертационной работе используются методы теории моделирования и вычислительной математики. Применяются основные подходы механики сплошных сред, численных методов и экспериментов. Математическая формулировка моделей соответствует задаче теории упругости в статической постановке. Рассматриваются понятия и принципы методов, лежащих в основе построения цифрового двойника по данным компьютерной томографии. Применяется технология виртуальных инструментов.

Численные расчёты проводились на основе метода конечных элементов. Методика построения расчётных сеток и вычислительный алгоритм

реализованы в программном комплексе, написанном на языке программирования *C++*. Метод прямого моделирования применялся для определения сходимости сетки при решении задач с заданными структурными свойствами. Натурные испытания проводились на универсальной разрывной машине «УТС 110М-100». Сканирование исследуемых образцов выполнялось с применением микро-/нанофокусной системы рентгеновского контроля для компьютерной томографии и 2D инспекции *Phoenix V/tome/X S240*.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Численное моделирование образцов из негомогенных материалов, находящихся под действием внешних нагрузок, на основе статического расчёта по данным с изображений.
2. Метод учёта пространственного распределения свойств материала при построении конечного элемента по данным компьютерной томографии.
3. Метод восстановления расчётной геометрии образца по данным с изображений и ассемблирование конечно-элементной сетки.
4. Результаты решения задач вычислительной механики деформируемого твёрдого тела, оценка упругих констант негомогенных материалов на основе совместного применения результатов численного моделирования и натуральных экспериментов.

Достоверность полученных результатов обеспечивается корректностью математической постановки задачи теории упругости, применением строгих математических методов, сравнением результатов с известными работами других авторов, а также с данными численного моделирования и физических экспериментов.

Апробация работы. Основные положения и полученные в диссертационной работе результаты докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях и симпозиумах: Ежегодная научно-практическая конференция с международным участием «Вреденовские чтения», Россия, г. Санкт-Петербург, 2018 г.; Международный научный симпозиум «Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред» имени А.Г. Горшкова, Россия, г. Кремёнки, 2019-2023 гг.; XI Молодёжная конференция по математическому моделированию и информационным технологиям «SMIT», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань, 2019 г.; Международная научная конференция «European Society of Biomechanics», Австрия, г. Вена, 2019 г.; Международная молодёжная научная конференция «Туполевские чтения (школа молодых учёных)», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань, 2019, 2021 гг.; Всероссийская молодёжная школа-конференция «Лобачевские чтения», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань, 2019, 2020 гг.; Международный научный семинар «Joint Seminar of Kazan Federal University and Kanazawa University on Biomechanics, Optimization and its Related Research», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань,

2020 г.; XIII Международная конференция «Сеточные методы для краевых задач и приложения», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань, 2020 г.; XIV Всероссийская конференция с международным участием «Биомеханика», Россия, г. Пермь, 2020 г.; XXII Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам, Россия, Респ. Крым, г. Алушта, 2021 г.; Международная конференция и молодёжная школа «Информационные технологии и нанотехнологии», Россия, г. Самара, 2021-2023 гг.; Международный форум «Kazan Digital Week», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань, 2021 г.; Международный научный симпозиум «Japan-Russia Online Joint Symposium», Россия, Респ. Татарстан, г. Казань, 2021 г.; Международная научная конференция «World Congress on Osteoporosis, Osteoarthritis and Musculoskeletal Diseases», онлайн-формат проведения, Германия, г. Берлин, 2022 г.; 56-е Ежегодная научная конференция «European Society for Clinical Investigation», Италия, г. Бари, 2022 г.; X Международная научная молодёжная школа-семинар «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» имени Е.В. Воскресенского», Россия, г. Саранск, 2022 г.; Всероссийская конференция молодых учёных-механиков, Россия, г. Сочи, 2022 г.; Международная конференция «Математический анализ и его приложения в современной математической физике», Узбекистан, г. Самарканд, 2022 г.; XXIII Зимняя школа по механике сплошных сред, Россия, г. Пермь, 2023 г.; Международная научно-практическая конференция «Рахматулиньские чтения», Узбекистан, г. Ташкент, 2023 г.; XXXII Всероссийская конференция «Математическое моделирование в естественных науках», Россия, г. Пермь, 2023 г.; V Международный форум «Передовые цифровые и производственные технологии», Россия, г. Санкт-Петербург, 2023 г.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 25 печатных изданиях, 4 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК [1–4], 4 – в периодических научных журналах, индексируемых *Web of Science* и *Scopus* [1–3; 5], 4 – в библиографической базе данных научных публикаций *Russian Science Citation Index* [1–4] и 20 – в тезисах докладов [10–29]. Зарегистрированы 4 программы для ЭВМ [6–9].

Личный вклад. Автор принимал активное участие в постановке задач, построении математических моделей и проведении численных и натурных испытаний образцов. Результаты деятельности автора могут быть изложены в следующем: проведён обзор литературы и методов моделирования, соответствующих тематике диссертационной работы; изучены способы восстановления механических свойств материала на основе данных о пространственном распределении плотности в среде; исследовано влияние структурных особенностей материала на прочностные характеристики модели; построена модель описания поведения образцов из негомогенных материалов методом прямого учёта распределения свойств

материала по данным с изображений; представлен подход к статическому расчёту образцов негомогенных сред на основе метода конечных элементов; разработан и реализован в виде программного кода численный алгоритм, позволяющий проводить вычисления образцов по данным их компьютерной томографии; проведено решение ряда показательных задач с целью верификации численной методики; выполнены построение и дальнейший расчёт модельных задач, соответствующих данным физических образцов; проведена оценка достоверности результатов моделирования на основе вычисления ошибок энергии; выполнена валидация численного метода путём проведения натурных испытаний костных органов крыс и свиней.

В работах [1–5] автору принадлежит большая часть текста обзоров. В исследованиях [1; 3; 5] автор принимал участие в проведении экспериментальных исследований и в обработке и интерпретации результатов. В публикации [2] автору принадлежат постановки задач, теоретическая часть, проведение численных расчётов и анализ результатов. В работах [3; 4] автор проводил постановку задач, построение моделей и принимал участие в получении экспериментальных данных.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагаются научная новизна и теоретическая и практическая значимость представляемой работы, описываются методология и методы исследования, приводятся основные положения, выносимые на защиту, обосновывается достоверность полученных результатов, подтверждается апробация работы, приводятся основные публикации по теме диссертации, устанавливается личный вклад автора представленной работы.

Первая глава посвящена изучению современного состояния исследований в области моделирования образцов из негомогенных материалов. Приводится литературный обзор, раскрывающий актуальные вопросы применения методов неразрушающего контроля в расчётах. Развитие методов аддитивного производства (Denisova, 2020), а также применение различных композиционных конструкций (Galati et al., 2021) определяют необходимость разработки новых подходов к вычислению прочностных свойств образцов. В качестве исследуемых структур могут рассматриваться как композиты (Mohammadi et al., 2016), так и многосвязные пористые объекты (Oefner et al., 2022). В этом случае натурные эксперименты не позволяют в полной мере решить проблему определения свойств материала, так как могут привести к значительной разнице в результатах (Sas et al., 2022). Таким образом, отсутствие разработанных методов оценки механических параметров негомогенных материалов определяет новизну

исследований, а трудоёмкость существующих подходов является причиной развития способов применения изображений в численных расчётах.

Вторая глава посвящена численному моделированию по данным с изображений объектов. Описание основных соотношений опубликовано в работах [2–5]. В первую очередь рассматриваются способы построения цифрового двойника объекта, в основе которых лежат интерпретация исходного массива данных и препроцессорная обработка значений (Oliver et al., 2011). Одним из наиболее распространённых методов получения изображений выступает проведение рентгеновской компьютерной томографии, результатом которого оказывается массив значений, каждое из которых характеризует проницаемость материала в соответствующем микрообъёме среды (вокселе). Нормированные согласно шкале Хаунсфилда величины могут быть интерпретированы в виде оптической плотности и пересчитаны в механические параметры среды (Gupta et al., 2004).

Далее во второй главе рассматриваются определяющие соотношения, описывающие построение по данным с изображений гексагонального восьмиузлового трёхмерного изопараметрического конечного элемента с линейной аппроксимацией. Зависимость матрицы упругих постоянных $[D(\{r\})]$ от вектора глобальных координат $\{r\}$ можно выразить как:

$$[D(\{r\})] = [D]\omega(\{r\}), \quad (1)$$

где $[D]$ – матрица упругости для однородного материала, $\omega(\{r\})$ – скалярная функция, определяющая негомогенные свойства среды.

Таким образом, в каждой точке пространства сохраняется связь между напряжениями и деформациями, соответствующая модели линейно-упругого тела, а свойства материала объясняются его структурными особенностями. В силу существования экспериментально установленной зависимости между единицами Хаунсфилда и механическими параметрами материала, значения функции $\omega(\{r\})$ могут применяться в качестве весов интегрирования, что приводит к следующему выражению для определения локальной матрицы жёсткости:

$$[K^e] = \iiint_{-1}^1 [B(\xi, \eta, \zeta)]^T [D][B(\xi, \eta, \zeta)] |J(\xi, \eta, \zeta)| \cdot \omega(\{r(\xi, \eta, \zeta)\}) d\xi d\eta d\zeta, \quad (2)$$

где $|J(\xi, \eta, \zeta)|$ – определитель Якоби для преобразования координат.

Интегрирование матрицы жёсткости может быть проведено методом средних прямоугольников. В этом случае шаг интегрирования соответствует размерам вокселей, а точки интегрирования определяют их геометрические центры. Допустимость взвешенного интегрирования основана на непрерывности функций формы, что позволяет рассматривать интеграл по объёму в виде суммы интегралов по подобъёмам, механические

свойства в каждом из которых полагаются постоянными. В работе [2] представлен анализ сходимости результатов моделирования двухфазной среды.

На основе полученных узловых перемещений может быть вычислено напряжённно-деформированное состояние, которое, в силу неравномерного распределения свойств материала, необходимо локально усреднять по объёму (Голованов и др., 2001). Оценка погрешности вычислений может быть проведена на основе локальной ошибки энергии (Зенкевич, 1975).

Также во второй главе рассматривалась задача построения конечно-элементного ансамбля, основанного на применении неортогональных и ортогональных сеток. Заключительным разделом выступало описание методики восстановления механических параметров материала на основе результатов вычислительных и натуральных экспериментов: применение линейных моделей предполагает линейную зависимость полученного решения от величины прикладываемого воздействия, что позволяет определять на основе результатов натурального эксперимента соотношение между действительной величиной возникающего усилия и моделируемой по данным компьютерной томографии в виде:

$$k = \tan(\beta_i) / \tan(\alpha), \quad (3)$$

где β_i – угол наклона касательной i -го линейного участка диаграммы разрушения, α – угол наклона касательной, определяемый моделированием.

Третья глава посвящена анализу результатов, исследованию сходимости представленного метода, а также валидации методики на основе проведения натуральных испытаний. Изложенные в третьей главе результаты опубликованы в работах [1; 2; 5]. В первой части выполняется общая постановка задачи и вводятся в рассмотрение основные соотношения механики деформируемого твёрдого тела. Механическое поведение системы, соответствующей объёму V в трёхмерном пространстве R^3 с заданной границей ∂V , в терминах линейной теории упругости описывается на основе известных соотношений (Седов, 1970). Уравнения равновесия имеют вид:

$$\nabla_i \sigma_{ij} = 0 : \quad \forall \{r\} \in V^0, \quad (4)$$

где $\{\nabla\}$ – оператор набла, $[\sigma]$ – тензор напряжений, $\{r\}$ – вектор координат и V^0 – объём занимаемого пространства V с границей ∂V : $V^0 = V \cup \partial V$.

Уравнения Коши выражаются соотношениями:

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l}{\partial r_k} \right) = \frac{1}{2} (\partial u_{k,l} + \partial u_{l,k}) : \quad \forall \{r\} \in V^0, \quad (5)$$

где $[\varepsilon]$ – тензор упругих деформаций и $\{u\}$ – вектор перемещений.

Обобщённый закон Гука может быть представлен в виде равенства:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} : \quad \forall \{r\} \in V^0, \quad (6)$$

где $[C]$ – тензор упругих постоянных четвёртого ранга.

Кинематические граничные условия могут быть определены как отсутствием перемещений на поверхности закрепления S_{dof} :

$$\{u(\{r\})\} = 0 : \quad \forall \{r\} \in S_{dof}, \quad (7)$$

так и приложением вектора перемещений $\{u_0\}$ на поверхности S_{disp} :

$$\{u(\{r\})\} = \{u_0\} : \quad \forall \{r\} \in S_{disp}, \quad (8)$$

где поверхность кинематического нагружения определяется областью: $S_{kinem} = S_{dof} \cup S_{disp}$.

Статические граничные условия выражаются на основе нормали $\{n\}$ к поверхности нагружения S_{stat} и определяются как отсутствием напряжений на свободной границе S_{free} :

$$\sigma_{ij}n_i = 0 : \quad \forall \{r\} \in S_{free}, \quad (9)$$

так и приложением распределённого по поверхности S_{force} усилия:

$$\sigma_{ij}n_i = q_j : \quad \forall \{r\} \in S_{force}, \quad (10)$$

где $\{q\}$ – вектор давления, на основе которого могут быть получены компоненты вектора реакции на эквивалентную силу:

$$\{F\} = \int_{S_{force}} \{q\} dS. \quad (11)$$

Поверхность статического нагружения соответствует области приложения статических граничных условий: $S_{stat} = S_{free} \cup S_{force}$. Поверхности кинематического и статического нагружения принадлежат внешней границе объёма V : $S_{kinem} \cup S_{stat} \in \partial V$.

Сходимость метода интегрирования проверялась на основе исследования влияния размера исходного изображения и геометрии расчётной области. В первом случае проводились расчёты с применением численной модели фиксированной геометрии, но с различным количеством точек интегрирования; материал предполагался однородным. Вычислительные эксперименты проводились на сжатие и сдвиг. На рисунке 1а) показано, что, начиная с 20 вокселей на ребре куба, количество квадратурных точек оказывает незначительное влияние (менее 0.1 %) на сходимость решения методом средних прямоугольников по отношению к методу Гаусса для прямоугольной геометрии. В силу постоянного размера расчётной сетки, количество выполняемых операций прямо пропорционально количеству узлов интегрирования и равно для двух способов нагружения образца (рис. 1б). Исходя из полученных результатов можно сделать вывод о том,

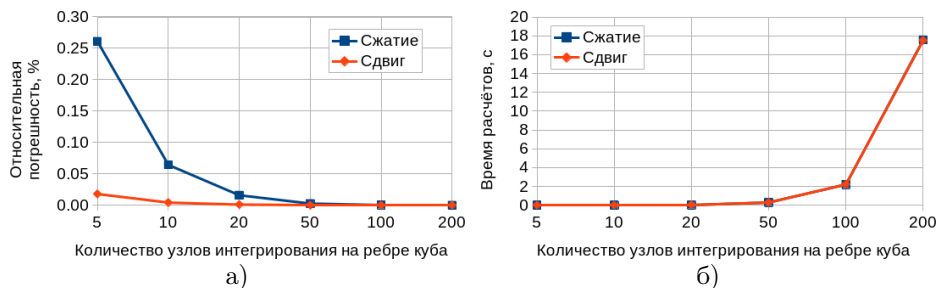


Рис. 1 — Результаты численных расчётов: а) – погрешность перемещений в нагруженных узлах сетки относительно решения методом Гаусса; б) – зависимость времени вычислений от количества узлов интегрирования.

что количество слагаемых в квадратурной сумме может определяться диапазоном $[20, 50]$ в направлении трёх декартовых координатных осей.

Оценка сходимости конечно-элементного ансамбля выполнялась на основе нагружения стержня квадратного поперечного сечения с одним характеристическим размером: вариационным параметром выступало количество конечных элементов, принадлежащих ребру куба заданной величины. Анализ результатов показал, что в случае нагружения на сжатие и изгиб расчёты, проводимые методом средних прямоугольников, отображают аналогичную решению в системе *Ansys* асимптотику. Величина погрешности не превышает 1 %, а относительная разница результатов – не более 0.01 % и 0.07 % для численных испытаний на сжатие и сдвиг, соответственно. Следует отметить, что постоянный объём массива данных компьютерной томографии определяет фиксированное число узлов интегрирования, вследствие чего увеличение расчётного времени объясняется в большей степени повышением размера глобальной матрицы жёсткости и, как следствие, размерности системы линейных алгебраических уравнений.

Численное моделирование костной ткани основано на предположении, что структурное распределение материала оказывает большее влияние на анизотропию свойств, чем изменение механических параметров. Исключение влияния последнего может быть достигнуто путём бинаризации исходного массива данных с изображений. Сходимость предложенного в данной работе подхода может быть исследована на основе оценки влияния весовой функции на примере двумерной постановки задачи. В качестве области нагружения использовалась прямоугольная геометрия в виде квадрата (рис. 2). Моделирование проводилось на основе массива данных, определяемого постоянным размером $100 \times 100 \times 1$ вокселей. Вариационным параметром выступало количество конечных элементов на стороне квадрата. Анализ полученных результатов проводился на основе вычисления погрешности перемещений в статически

нагруженных узлах сетки относительно как аналитического решения (для пористого образца), так и численного моделирования в системе *Ansys* (для обоих образцов) на основе конечного элемента типа *Solid185*.

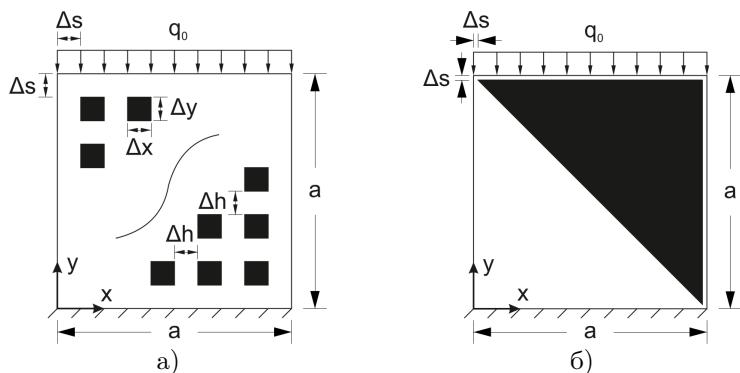


Рис. 2 — Схема нагружения образцов: а) — равномерная пористость (Δx и Δy — размер поры в направлении осей Ox и Oy , соответственно; Δh — расстояние между порами; Δs — толщина внешней стенки); б) — треугольный вырез (Δs — толщина остаточного слоя).

Исследование влияния равномерного заполнения материалом некоторой области на жёсткость образованной негетогенной среды может быть проведено на основе моделирования изображения, соответствующего двухфазному веществу, предполагающему наличие упругого материала и пустоты, описывающей поры, влияние возникающих сил реакции в которых пренебрежительно мало (рис. 2а). Анализ погрешности перемещений узлов на верхней линии геометрии относительно решения, полученного в системе *Ansys*, показал, что расхождение значений численного моделирования не превышает 9.5 % и стремится к нулю (рис. 3а). Равномерное распределение особенностей материала позволяет провести аналитический расчёт деформированного состояния образца на основе известных соотношений закона механической смеси (Скворцов, 2013). На рисунке 3б представлена погрешность перемещений для среднего узла верхней линии сетки относительно решения, полученного аналитическим способом.

Оценка влияния неравномерного распределения материала может быть проведена воссозданием полости в виде треугольного выреза (рис. 2б), что нарушает симметрию механических свойств относительно оси приложения сжимающей нагрузки. В отличие от пористого образца (рис. 2а), дискретизация области приводит к возникновению макрообъёмов с отсутствием материала, соответствующих нулевым значениям компонент локальной матрицы жёсткости. Исключение влияния данного эффекта

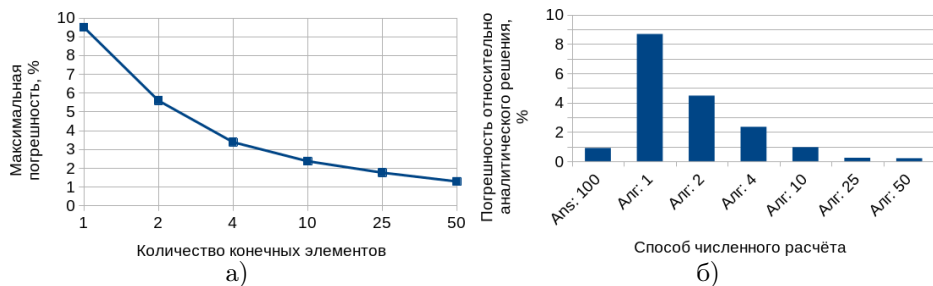


Рис. 3 — Результаты численных расчётов: а) — максимальная относительная (*Ansys*) погрешность перемещений в нагруженных узлах сетки в зависимости от количества конечных элементов; б) — погрешность перемещений в нагруженных узлах сетки относительно аналитического решения.

может быть достигнуто удалением конечных элементов с низким содержанием материала. Результаты показали, что применение более 25-ти конечных элементов на стороне квадрата приводит к погрешности около 10 % относительно прямого моделирования в системе *Ansys*.

В качестве экспериментальных образцов рассматривались кости конечностей крыс и свиней. Механические свойства костной ткани соответствовали линейно-упругому материалу (Hsieh et al., 2023). В работе (Maquer et al., 2015) было установлено, что объёмная доля и структурная анизотропия кости объясняют до 98 % изменений её упругих свойств, что позволяет рассматривать костный материал в виде двухфазной среды (Moreno et al., 2014). Протокол экспериментов был одобрен Комитетом по уходу за животными Казанского государственного медицинского университета (протокол № 5 от 20 мая 2020 года).

Первой модельной задачей выступала реализация сглаженной аппроксимации геометрии. Использовались данные компьютерной томографии диафиза бедренной кости крысы (рис. 4а): размер исследуемой области составлял $4.21 \times 3.46 \times 5.89$ мм, количество вокселей в направлении соответствующих координатных осей Ox , Oy и Oz — $624 \times 512 \times 874$, размер вокселя — $6.747 \times 6.747 \times 6.747$ мкм. На рисунках 4б и 4в представлены расчётные сетки, определяемые 44 и 1200 конечными элементами, соответственно. Узлы нижней грани фиксировались в перемещении вдоль трёх координатных осей Ox , Oy и Oz . На верхнем торце прикладывалось равномерно распределённое по узлам продольное сжимающее усилие величиной 1 кН. Модуль упругости Юнга составлял 30 ГПа (Shefelbine et al., 2005), коэффициент Пуассона — 0.3. Принадлежность квадратурных точек интегрирования расчётной области устанавливалась согласно геометрическим центрам вокселей. Время расчётов находилось в пределах 6-10 минут.

Анализ полученного решения показал, что модель из 44 конечных элементов (рис. 5а) оказалась более жёсткой, чем модель из 1200 конечных элементов (рис. 5б), что объясняется как меньшим количеством степеней свободы, так и степенью аппроксимации геометрии. Рост значений стандартного отклонения перемещений для узлов верхнего торца оказывается следствием увеличения количества узлов на поверхности нагружения, что приводит к изменению формы её деформированного состояния.

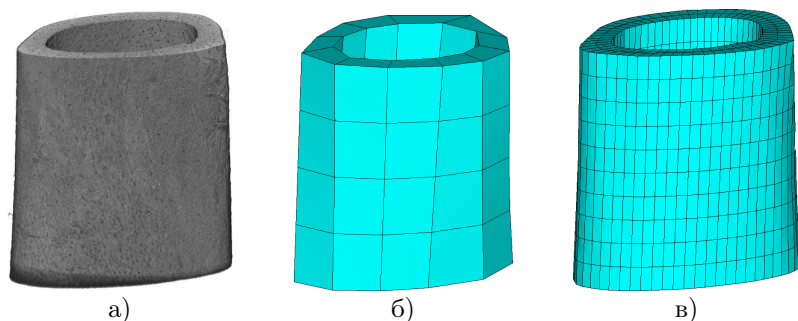


Рис. 4 — Моделирование диафиза бедренной кости крысы: а) — компьютерная томография; б), в) — сетки различной степени дискретизации.

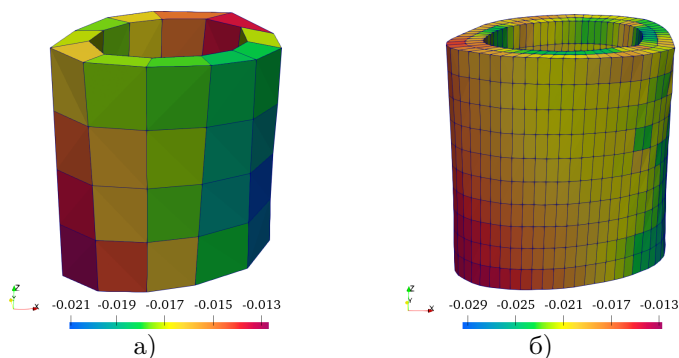


Рис. 5 — Распределение значений поля деформаций в направлении приложения нагрузки: а) и б) — 44 и 1200 конечных элементов, соответственно.

Следующей модельной задачей выступала реализация расчётной сетки методом фильтрации. Рассматривался образец плечевой кости минипига: объём данных компьютерной томографии составлял $752 \times 752 \times$

752 элементов (рис. 6а), размер вокселя – $0.2 \times 0.2 \times 0.2$ мм, габариты сканируемой области – $150.4 \times 150.4 \times 150.4$ мм. Численное моделирование костного органа проводилось на двух сетках: в направлении каждой координатной оси устанавливалось 20 и 40 конечных элементов, соответственно. Конечные элементы, содержание костного материала в которых оказывалось ниже 5 % (рис. 6б), исключались из расчётной области. Исходный модуль упругости Юнга составлял 30 ГПа, коэффициент Пуассона – 0.3. Прикладывались перемещения, равные 1, 2, 3 и 4 мм. Время вычислений варьировалось в пределах 15 минут. Образец также подвергался натурному эксперименту: дистальный и проксимальный участки упруго защемлялись, в верхней области диафиза прикладывался индентор.

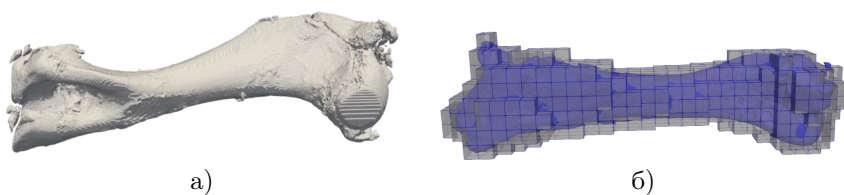


Рис. 6 — Моделирование плечевой кости минипига: а) — компьютерная томография; б) — конечно-элементная сетка.

Анализ результатов на основе сетки с 40 конечными элементами установил, что минимальная ошибка энергии (20 %) и максимальное значение эквивалентного напряжения по Мизесу (500 МПа) соответствовали области, расположенной вблизи приложения нагрузки. Распределение значений главных компонент тензора напряжений показало, что в области максимума значений эквивалентного напряжения по Мизесу первая главная компонента достигает наибольшего значения (рис. 7а и 7б, 400 МПа), а 3-я – наименьшего (рис. 7в и 7г, -400 МПа), что коррелирует с образованием трещины в образце при проведении натурного эксперимента (рис. 8), так как полученные значения превышают предел прочности костной ткани (Стеценко и др., 2011). Сравнительный анализ с данными натурного эксперимента проводился на основе вычисления эквивалентного усилия в области приложения кинематического нагружения: относительная ошибка варьировалась в пределах от 3 до 15 %, область образования трещины соответствовала данным численного эксперимента.

Следующей задачей выступало определение механических параметров материала. Рассматривался образец предплечевой кости минипига: размер данных компьютерной томографии составлял $752 \times 752 \times 752$ элементов (рис. 9), величина вокселя – $0.2 \times 0.2 \times 0.2$ мм, габариты сканируемой области – $150.4 \times 150.4 \times 150.4$ мм. Численное моделирование проводилось

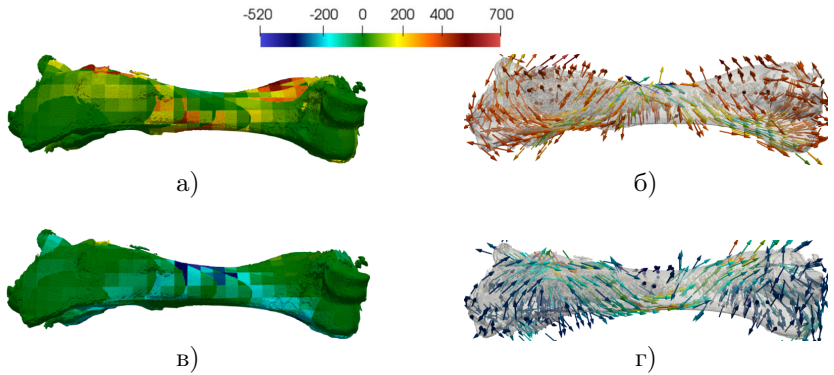


Рис. 7 — Результаты расчётов (40 конечных элементов): а) и в) — распределение значений первой и третьей главных компонент тензора напряжений, (МПа); б) и г) — направления соответствующих компонент.



Рис. 8 — Натурный эксперимент: образование трещины в области диафиза.

на расчётных сетках с использованием 20, 40 и 80 конечных элементов — первая (рис. 9а), вторая (рис. 9б) и третья (рис. 9в) модель, соответственно. Фильтрация области выполнялась с пороговым значением, равным 5 %. Характер граничных условий соответствовал постановке предыдущей задачи. Исходное значение модуля упругости Юнга принималось равным 1 ГПа, коэффициента Пуассона — 0.3. Исследование результатов выполнялось в точках, соответствующих перемещениям 1, 2 и 3 мм. Время вычислений не превышало 14 минут.

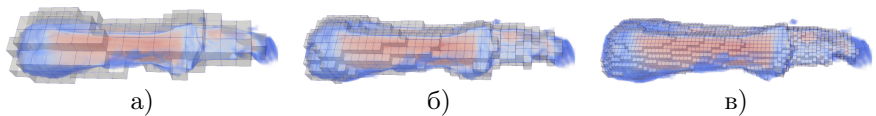


Рис. 9 — Моделирование предплечевой кости мини-пига: а), б) и в) — сетки с 20, 40 и 80 конечными элементами на стороне области, соответственно.

Диаграммы нагружения образца позволили определить угол наклона касательных и вычислить коэффициенты пропорциональности для значений модуля упругости Юнга и касательного модуля (рис. 10). Полученные для костной структуры величины варьируются в пределах 2 % и соответствуют истинным значениям механических параметров (Kieser et al., 2014).

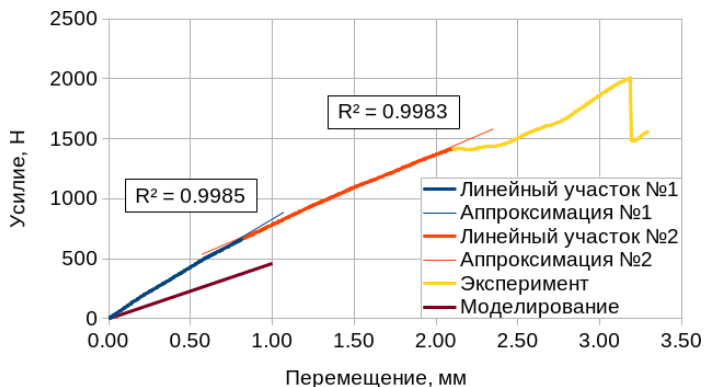


Рис. 10 — Диаграмма нагружения образца (первая модель).

Валидация предложенной методики также выполнялась на основе моделирования разных видов костей. Анализ результатов показал небольшое стандартное отклонение внутри подгрупп передних (5.22 %) и задних (13.89 %) конечностей, но значительную разницу между подгруппами, что также подтверждается в работах (Стеценко и др., 2011; Шлёпкина, 2021).

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Предложен и реализован новый подход к прямому учёту механических свойств образцов из негетерогенных материалов на основе данных с изображений исследуемой области.
2. Предложен и реализован алгоритм сегментации расчётной области на основе фильтрации регулярной ортогональной конечно-элементной сетки.
3. Представлено обоснование применимости метода взвешенного интегрирования к образцам пористой структуры.
4. Рассмотрена сходимость сеточного метода на примере решения показательных задач.
5. Проведены расчёты по данным компьютерной томографии биологических образцов костных органов животных.
6. Предложена и реализована методика восстановления механических свойств образцов из негетерогенных материалов на основе совокупного применения методов численного моделирования и натурного эксперимента.

Публикации автора по теме диссертации

В изданиях из списка ВАК РФ, а также входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science

1. *Воробьёв О.В.* Конечно-элементная оценка деформированного состояния по данным компьютерной томографии / Воробьёв О.В., Семёнова Е.В., Мухин Д.А., Стаценко Е.О., Балтина Т.В., **Герасимов О.В.** // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. — 2021. — № 2. — С. 44–54. — DOI: 10.15593/perm.mech/2021.2.05. — (ВАК, Scopus, RSCI; Q3, IS 0.54).
2. *Герасимов О.В.* Построение механической модели элементов гетерогенной среды на основе численно-цифрового алгоритма обработки данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Бережной Д.В., Большаков П.В., Стаценко Е.О., Саченков О.А. // Российский журнал биомеханики. — 2019. — Т. 23, № 1. — С. 87–97. — DOI: 10.15593/RJBiomech/2019.1.10. — (ВАК, Scopus, RSCI; Q4, IS 0.49, K1).
3. *Герасимов О.В.* Определение механических свойств костной ткани численно-цифровым методом на основе данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Рахматулин Р.Р., Балтина Т.В., Саченков О.А. // Российский журнал биомеханики. — 2023. — Т. 27, № 3. — С. 53–66. — DOI: 10.15593/RZhBiomech/2023.3.04. — (ВАК, Scopus, RSCI; Q4, IS 0.49, K1).
4. *Герасимов О.В.* Определение напряженно-деформированного состояния костей по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Рахматулин Р.Р., Балтина Т.В., Саченков О.А. // Известия высших учебных заведений. Машиностроение. — 2023. — Т. 8 (761). — С. 3–15. — DOI: 10.18698/0536-1044-2023-8-3-15. — (ВАК, RSCI; K1).
5. *Gerasimov, O.V.* Bone Stress-Strain State Evaluation Using CT Based FEM / **Gerasimov, O.V.**, Kharin, N.V., Fedyanin, A.O., Bolshakov, P.V., Baltin, M.E., Statsenko, E.O., Fadeev, F.O., Islamov, R.R., Baltina, T.V., Sachenkov, O.A. // Frontiers in Mechanical Engineering. — 2021. — Vol. 7. — P. 688474. — DOI: 10.3389/fmech.2021.688474. — (Scopus, Web of Science; Q2, IS 2.44, IF 2.3).

Зарегистрированные программы для ЭВМ

6. Программа автоматизированной оценки прочности элементов негомогенных сред по данным их компьютерной томографии : пат. 2022668571 / Саченков О.А., Рахматулин Р.Р., **Герасимов О.В.** ; Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"(ФГАОУ ВО КФУ). — Заявл. 10.10.2022.
7. Программа анализа изображений биологических объектов : пат. 2017662477 / Саченков О.А., Балтина Т.В., **Герасимов О.В.** ; Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"(ФГАОУ ВО КФУ). — Заявл. 11.09.2017.
8. Программа анализа трёхмерных изображений биологических объектов : пат. 2018661542 / Саченков О.А., Балтина Т.В., **Герасимов О.В.**, Семёнова Е.В. ; Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"(ФГАОУ ВО КФУ). — Заявл. 09.07.2018.
9. Программа для построения конечно-элементного ансамбля по данным компьютерной томографии : пат. 2019664273 / Саченков О.А., Харин Н.В., **Герасимов О.В.**, Шайхутдинова Л.В. ; Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"(ФГАОУ ВО КФУ). — Заявл. 11.01.2019.

В сборниках трудов конференций

10. *Воробьев О.* Оценка деформированного состояния методом конечных элементов на основе изображений / Воробьев О., Семенова Е., Мухин Д., Стаценко Е., Балтина Т., **Герасимов О.** // Математическое моделирование в естественных науках (XXIX Всероссийская школа-конференция). — 2020. — С. 25. — (РИНЦ).
11. **Герасимов О.В.** Конечно-элементное моделирование костных органов на основе данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.** // XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых) (Международная молодёжная научная конференция, посвященная 60-летию со дня осуществления Первого полета человека в космическое пространство и 90-летию Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева-КАИ). — Казань, 2021. — С. 417–419. — (РИНЦ).

12. *Герасимов О.В.* Моделирование элемента пористой среды на основе данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.** // XXIV Туполевские чтения (школа молодых ученых) (Международная молодёжная научная конференция). — Казань, 2019. — С. 164–166. — (РИНЦ).
13. *Герасимов О.В.* Конечно-элементное моделирование костных органов на основе данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Акифьев К.Н., Рахматулин Р.Р., Стаценко О.Е., Саченков О.А. // (XXII Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам). — Москва, 2021. — С. 536–538. — (РИНЦ).
14. *Герасимов О.В.* Биомеханическое моделирование методом конечных элементов по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Большаков П.В., Рахматуллин Р.Р., Шарафутдинова К.Р., Стаценко Е.О., Саченков О.А. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXIX Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2023. — С. 86–87. — (РИНЦ).
15. *Герасимов О.В.* Построение конечно элементной модели по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Большаков П.В., Рахматуллин Р.Р., Шарафутдинова К.Р., Стаценко Е.О., Саченков О.А. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXVIII Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2022. — С. 68–69. — (РИНЦ).
16. *Герасимов О.В.* Анализ напряжённо-деформированного состояния кости по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Большаков П.В., Стаценко Е.О., Саченков О.А. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXVII Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2021. — С. 76–78. — (РИНЦ).
17. *Герасимов О.В.* Конечно-элементное моделирование с учетом данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Большаков П.В., Харин Н.В., Стаценко Е.О., Саченков О.А. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXVI Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2020. — С. 40–41. — (РИНЦ).
18. *Герасимов О.В.* Построение конечно элементной модели по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Большаков П.В., Харин Н.В., Стаценко Е.О., Саченков О.А. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXV Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2019. — С. 66–67. — (РИНЦ).

19. *Герасимов О.В.* Построение репрезентативной конечно элементной модели по данным томографии / **Герасимов О.В.**, Воробьев О.В., Королева Е.В., Саченков О.А., Харин Н.В. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXIV Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2018. — С. 32–33. — (РИНЦ).
20. *Герасимов О.В.* Определение распределения механических свойств органа из костной ткани по данным томографии / **Герасимов О.В.**, Воробьев О.В., Семенова Е.В., Харин Н.В., Саченков О.А. // Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций (XII Международная конференция). — 2018. — С. 338. — (РИНЦ).
21. *Герасимов О.В.* Моделирование распределения механических свойств костной ткани под действием внешней нагрузки / **Герасимов О.В.**, Королева Е.В., Саченков О.А., Коноплев Ю.Г. // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXIV Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2018. — С. 34–35. — (РИНЦ).
22. *Герасимов О.В.* Определение напряженно-деформированного состояния тела с учетом внутренних дефектов, определяемых компьютерной томографией / **Герасимов О.В.**, Мухин Д.А., Семенова Е.В., Яикова В.В., Харин Н.В. // Машиностроение: инновационные аспекты развития (II Международная научно-практическая конференция). — 2019. — С. 170–173. — (РИНЦ).
23. *Герасимов О.В.* Моделирование напряженно-деформированного состояния по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Рахматулин Р.Р., Саченков О.А. // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред (11-ая Всероссийская научная конференция с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского). — Москва, 2021. — С. 273–279. — (РИНЦ).
24. *Герасимов О.В.* Численное моделирование поведения гетерогенной среды под действием внешних нагрузок / **Герасимов О.В.**, Стаценко Е.О., Харин Н.В., Федянин А.О., Бережной Д.В., Саченков О.А. // Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред (8-ая Всероссийская научная конференция с международным участием им. И.Ф. Образцова и Ю.Г. Яновского). — 2018. — С. 25. — (РИНЦ).
25. *Герасимов О.В.* Построение модели органа из костной ткани по данным компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Харин Н.В., Саченков О.А., Коноплев Ю.Г. // Динамические и технологические

- проблемы механики конструкций и сплошных сред (XXIV Международный симпозиум им. А.Г. Горшкова). — Москва, 2018. — С. 35–36. — (РИНЦ).
26. *Герасимов О.В.* Конечно-элементное моделирование органов с учетом данных компьютерной томографии / **Герасимов О.В.**, Шайхутдинова Л.В., Стаценко Е.О., Хабибуллин А.А., Бережной Д.В., Саченков О.А. // Биомеханика (XIV Всероссийская конференция с международным участием). — Пермь, 2020. — С. 87–91. — (РИНЦ).
 27. *Gerasimov, O.* Patient-Specific Bone Organ Modeling Using CT Based FEM / **Gerasimov, O.**, Kharin, N., Statsenko, E., Mukhin, D., Berezhnoi, D., Sachenkov, O. // Mesh Methods for Boundary-Value Problems and Applications. Vol. 141. — 2022. — P. 125–139. — (Lecture Notes in Computational Science and Engineering). — DOI: 10.1007/978-3-030-87809-2_10. — (Scopus; Q3, IS 0.43).
 28. *Gerasimov, O.* Direct image-based micro finite element modelling of bone tissue / **Gerasimov, O.**, Kharin, N., Yaikova, V., Statsenko, E., Baltina, T. // MATEC Web of Conferences. — 2020. — Vol. 329. — P. 03072. — DOI: 10.1051/mateconf/202032903072. — (Web of Science).
 29. *Gerasimov, O.* Application of a digital prototype for CT-based bone strength analysis / **Gerasimov, O.**, Sharafutdinova, K., Rakhmatullin, R., Baltina, T., Baltin, M., Fedianin, A. // 2022 VIII International Conference on Information Technology and Nanotechnology. — 2022. — P. 1–6. — DOI: 10.1109/ITNT55410.2022.9848693. — (Scopus, Web of Science, RSCI).