

Численное моделирование деформационного поведения полимерных решетчатых структур с градиентом пористости, изготовленных на основе аддитивных технологий*

Н. В. Еленская¹, М. А. Ташинов¹, В. В. Зильбершмидт²

¹ Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Российская Федерация, 614990, Пермь, Комсомольский пр., 29

² Университет Лафборо, Великобритания, LE11 3TU, Лафборо, Эпинал Уэй

Для цитирования: Еленская Н. В., Ташинов М. А., Зильбершмидт В. В. Численное моделирование деформационного поведения полимерных решетчатых структур с градиентом пористости, изготовленных на основе аддитивных технологий // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 4. С. 679–692. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.410>

Исследуются вопросы механического поведения градиентных решетчатых структур, геометрия которых создана на основе аналитического определения трехмерных трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП). Рассмотрены несколько однородных и градиентных решетчатых моделей с различными типами геометрии предельного объема и параметрами градиента. Проведена валидация численных моделей с помощью данных, полученных экспериментально с использованием видеосистемы Vic-3D Micro-DIC. Представлены результаты численного моделирования деформационного поведения градиентных структур с геометрией на основе ТПМП Шоена G (гиرويد) при одноосном сжатии. Изучено влияние параметров структуры и свойств градиента на механическое поведение.

Ключевые слова: трижды периодические минимальные поверхности, двухфазные структуры, метод конечных элементов, функциональный градиент, микроструктура.

1. Введение. Активное развитие технологий аддитивного производства (3D-печать) открывает новые возможности для проектирования и производства сложных структур с оптимальными свойствами [1–6]. Одним из решений для удовлетворения потребности в эффективных, легких и одновременно прочных конструкциях является использование периодических и непериодических решетчатых структур [7–9]. Такие новые конструкционные системы имеют большой потенциал для широкого спектра применений — от современных инженерных приложений до биомедицинских продуктов [10–14], в частности в области ортопедии, где решетчатые пористые скаффолды находят широкое применение в качестве подходящих заменителей поврежденной костной ткани [15–17].

* Исследование выполнено в Пермском национальном исследовательском политехническом университете в рамках гранта, выделяемого для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных организациях высшего образования, научных учреждениях и государственных научных центрах Российской Федерации, соглашение № 075-15-2021-578 от 31.05.2021.

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

Дефекты костной ткани, изучаемые в ортопедии, как правило, вызваны травматическими повреждениями, инфекцией, либо хирургическим удалением части тканей при лечении других заболеваний. Несмотря на то, что кости обладают способностью к самовосстановлению, зачастую для терапии требуется имплантация заменителя кости, когда размер поврежденных областей слишком велик для заживления [18, 19]. Пористые скаффолды для имплантации должны хорошо интегрироваться с костью и обладать соответствующими механическими свойствами. Кроме того, для транспорта питательных веществ сквозь пористый скаффолд необходима достаточная степень их проницаемости [15]. Проницаемость может быть улучшена за счет увеличения пористости, однако это повлияет на механические свойства структуры, например снижение механических характеристик [20]. Поэтому разработка скаффолдов, обладающих в достаточной мере, с одной стороны, хорошими механическими свойствами и прочностными характеристиками, с другой — высокой проницаемостью, является достаточно сложной задачей.

Одной из концепций получения решетчатых структур с нетривиальным поведением является задание контролируемого градиента свойств. В последние годы значительно возрос интерес к пористым 3D-печатным функционально-градиентным изделиям. В таких структурах локальные механические свойства изменяются в зависимости от пространственных координат. Градиент морфологических свойств структур играет решающую роль в распределении напряжений в них, а также в изменении глобальных механических свойств. Важным аспектом градиентных структур является сглаживание градиентов напряжений с целью минимизации появления концентраций напряжений, вызванных резкими геометрическими изменениями.

Данная работа посвящена моделированию особенностей деформационного поведения трехмерных решетчатых структур (однородных и градиентных с вариацией размера пористой фазы), изготовленных с использованием аддитивных технологий из полилактида (PLA). Геометрические трехмерные модели решетчатых структур были получены с использованием трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП) с различными параметрами пористости и размерами элементарной ячейки. Численный анализ этих структур проводился с использованием метода конечных элементов (МКЭ), а валидация представленных моделей выполнена на основе экспериментальных данных, полученных и обработанных с использованием метода цифровой корреляции изображений.

2. Моделирование периодических решетчатых структур. В представленном исследовании для синтеза моделей взаимопроникающих решетчатых структур открытого типа использовались методы, основанные на аналитическом определении трехмерных поверхностей, разделяющих две фазы. Рассматривались модели с периодической структурой, для генерации которых использовались аналитические выражения трижды периодических минимальных поверхностей, содержащие сумму произведений тригонометрических функций. Распространенным подходом к созданию упорядоченных двухфазных микроструктур является использование ТПМП, обладающих симметрией кристаллографических групп. В качестве примера ниже представлены наиболее часто используемые выражения для ТПМП:

уравнение поверхности Шварца D

$$\begin{aligned} \phi_D(x, y, z) = \sin(\alpha x)(\sin(\gamma y)\sin(\beta z) + \cos(\gamma y)\cos(\beta z)) + \\ + \cos(\alpha x)(\sin(\gamma y)\cos(\beta z) + \cos(\gamma y)\sin(\beta z)) + t = 0; \end{aligned} \quad (1)$$

уравнение поверхности Шварца Р

$$\phi_P(x, y, z) = \cos(\alpha x) + \cos(\gamma y) + \cos(\beta z) + t = 0; \quad (2)$$

уравнение поверхности Шоена G

$$\phi_G(x, y, z) = \cos(\alpha x) \sin(\beta z) + \cos(\beta z) \sin(\gamma y) + \cos(\gamma y) \sin(\alpha x) + t = 0; \quad (3)$$

уравнение поверхности Фишера – Коха S

$$\begin{aligned} \phi_{FKS}(x, y, z) = \cos(2\alpha x) \sin(\gamma y) \cos(\beta z) + \cos(\alpha x) \cos(2\gamma y) \sin(\beta z) + \\ + \sin(\alpha x) \cos(\gamma y) \cos(2\beta z) + t = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где α, β, γ – параметры, оказывающие влияние на характерный размер элементарной ячейки периодической структуры; t – параметр, влияющий на объемную долю пространства, отсекаемого ТПМП.

Структуры, построенные из выражений (1)–(4), сами по себе представляют лишь гладкую поверхность и не имеют объема. Тем не менее, обратив (1)–(4) в неравенства, можно получить твердое тело для случая $\phi_i(x, y, z) \leq 0$ и пористую фазу структуры при $\phi_i(x, y, z) > 0$. Полученные таким образом твердые тела представлены на рис. 1.

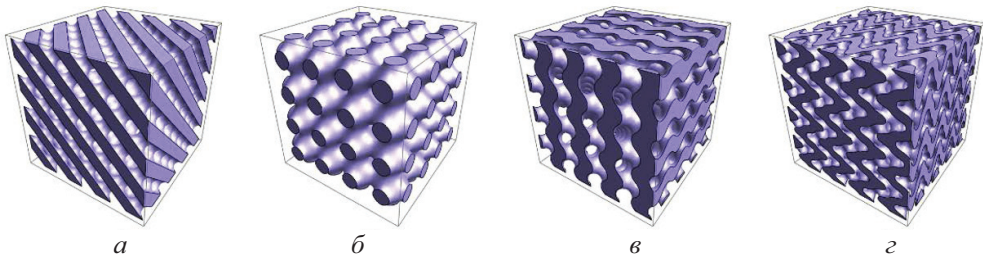


Рис. 1. Матрицы двухфазных взаимопроникающих решетчатых структур, включающие 4×4 элементарных ячеек на основе ТПМП: а – структура на основе выражения (1); б – структура на основе выражения (2); в – структура на основе выражения (3); з – структура на основе выражения (4). Параметры в выражениях (1)–(4): $\alpha = \beta = \gamma = \frac{2\pi n}{L}$, где $n = 4$, L – габаритный размер структуры, $t = 0$.

Чтобы получить из выражений (1)–(4) функционально-градиентные структуры, параметры размера ячейки α, β, γ и параметр пористости t необходимо заменить функциями, зависящими от одной или нескольких координат. В общем случае геометрия функционально-градиентной структуры на основе поверхности Шоена G будет описываться следующим выражением:

$$\begin{aligned} \phi_G(x, y, z) = \cos(\alpha(x, y, z) x) \sin(\beta(x, y, z) z) + \cos(\beta(x, y, z) z) \sin(\gamma(x, y, z) y) + \\ + \cos(\gamma(x, y, z) y) \sin(\alpha(x, y, z) x) + t(x, y, z) \leq 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Варианты функционально-градиентных структур для некоторых частных случаев выражения (5) представлены на рис. 2.

В представленном исследовании основное внимание уделяется структурам на основе поверхности Шоена G с линейным градиентом плотности. Проводится сравнение ее механического отклика на приложенные нагрузки в зависимости от доли

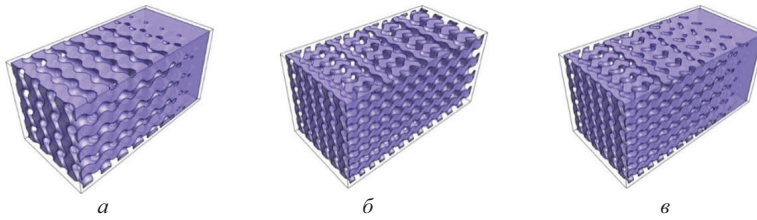


Рис. 2. Функционально-градиентные пористые структуры на основе ТПМП Шоена G: а – с линейным градиентом плотности от 0 до 50 % пористости, $\alpha = \beta = \gamma = \frac{2\pi n}{L}$, где $n=4$, $L=15$, $t = 0.04984y - 1.5$; б – с линейным градиентом характерного размера ячейки, $\alpha(y) = \beta(y) = \gamma(y) = 1.256(0.00833 y + 1)$; в – с сочетанием линейных градиентов плотности и характерного размера ячейки, от 0 до 50 % пористости, $\alpha(y) = \beta(y) = \gamma(y) = 1.256(0.00833 y + 1)$, $t = 0.04984y - 1.5$.

пористости, а также сравнение с однородными пористыми структурами того же типа геометрии и сплошным образцом.

3. Численная постановка задачи. В данной работе изучается деформационное поведение функционально-градиентных решетчатых структур. Акцент сделан на структуры с функциональным градиентом, который оказывает влияние на объемную долю пористой фазы вдоль одной из осей координат. Были сгенерированы структуры на основе поверхности Шоена G с различной долей пористости и законом ее изменения (рис. 3) вдоль оси Y.

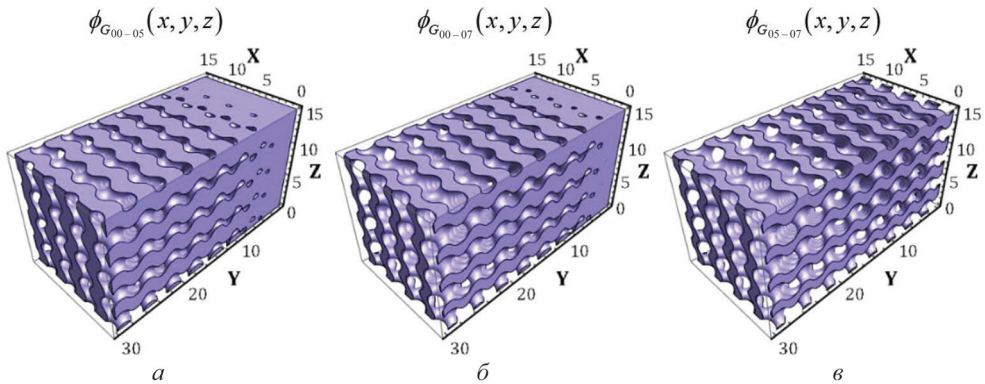


Рис. 3. Модели градиентных открыто-решетчатых структур разной пористости на основе выражения (3), $\alpha = \beta = \gamma = \frac{2\pi n}{L}$, $n=4$, $L=15$: а – объемная доля пор вдоль направления действия градиента от 0 до 50 %, параметры градиента $t = 0.04984y - 1.5$; б – объемная доля пор вдоль направления действия градиента от 0 до 70 %, $t = 0.0696y - 1.5$; в – объемная доля пор вдоль направления действия градиента от 50 до 70 %, параметры градиента $t = 0.0196y$.

Предполагается, что глобальные деформации модели под действием внешних сжимающих нагрузок не выходят за пределы упругой зоны нагружения, а механические свойства структур на основе ТПМП подчиняются определяющим соотношениям в виде закона Гука для изотропных сред:

$$\bar{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \bar{\epsilon}_{kl}. \quad (6)$$

В качестве модели материала был выбран биосовместимый полимер — PLA, часто используемый при производстве с помощью аддитивных технологий. Для упрощения решаемой задачи предполагалось, что материал ведет себя как квазиизотропный, что подтвердила дальнейшая верификация численной модели. Упругий модуль полилактида был определен экспериментально и принят равным $E = 2717$ МПа. Коэффициент Пуассона $\nu = 0.33$. Плотность материала $\rho = 1.23$ г/см³. В случае чрезмерных нагрузок предполагается, что разрушение образцов будет происходить хрупко, предел прочности для выбранного материала был определен экспериментально и составил $\sigma_c = 45.5$ МПа.

Габаритные размеры представленных моделей составляют $15 \times 30 \times 15$ мм, количество элементарных ячеек $4 \times 8 \times 4$ по каждому габариту соответственно. Численное решение задачи выполнено с использованием МКЭ, дискретизация выполнена с тетраэдрическим типом конечных элементов (КЭ). Анализировалось поведение образцов при сжатии вдоль оси действия градиента, схема нагружения представлена на рис. 4.

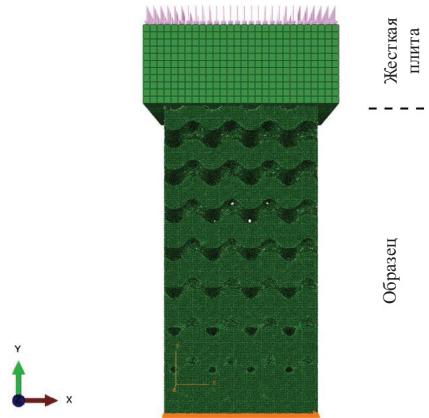


Рис. 4. Приложение граничных условий на примере функционально-градиентной структуры на основе поверхности Шоена G.

Нижняя грань структуры фиксировалась по двум узлам, расположенным на одной прямой по границам габарита. Для всех узлов нижней грани запрещались перемещения вдоль оси действия градиента. Нагружение структуры происходило с использованием вспомогательной абсолютно жесткой нагрузочной плиты для равномерного распределения нагрузки. Общая нагрузка распределялась по верхней грани плиты, ее максимальное значение составило 1 кН для всех представленных структур. Размер нагрузки соответствовал уровню, используемому при испытании на сжатие однородных пористых структур того же типа геометрии, объемная доля которых соответствовала пористости верхних граней функционально-градиентных моделей.

4. Верификация предложенной численной модели. Были проведены предварительные испытания 3D-печатных кубических однородных образцов прототипов скаффолдов с геометрией на основе поверхности Шоена G. Кубические образцы испытывались на сжатие перпендикулярно слоям печати, имитируя основную нагрузку, которой подвергаются костные скаффолды в процессе эксплуатации. Га-

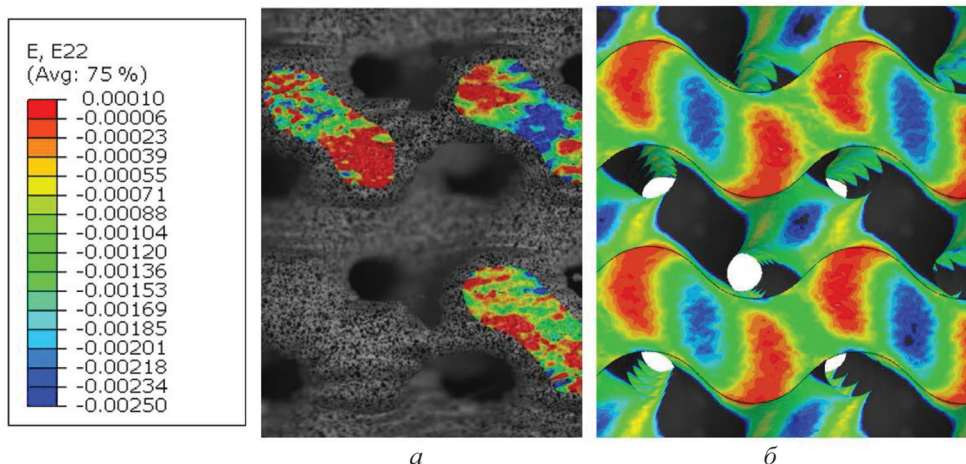


Рис. 5. Распределение полей ε_{22} деформаций для структуры на основе поверхности Шоена G, полученные для нагрузки 1 кН: *a* — экспериментально с использованием Vic-3D Micro-DIC; *б* — численно с использованием МКЭ в прикладном пакете Abaqus.

баритные размеры моделей составляли $15 \times 15 \times 15$ мм, материал PLA. По аналогии были созданы численные модели с такими же условиями закрепления и нагружения, какие описаны для функционально-градиентных структур в предыдущем разделе. На рис. 5 представлено сопоставление экспериментальных и расчетных деформационных полей для структуры с пористостью 50 % под воздействием общей нагрузки 1 кН. Экспериментальные значения были получены методом цифровой корреляции изображений с использованием видеосистемы Vic-3D Micro-DIC.

Сравнивая представленные поля деформаций, можно заметить, что основные различия связаны с микроконцентраторами, возникающими из-за погрешностей при печати образцов. В основном же наблюдается качественное и количественное (с допустимой погрешностью) совпадение результатов, что говорит о достаточной достоверности численных моделей механического поведения образцов.

5. Анализ результатов. Был проведен анализ деформационного поведения структур под воздействием сжимающих нагрузок. Для созданных КЭ-моделей с различной объемной долей пористой фазы с целью оценки характера распределения напряжений в образцах были построены соответствующие гистограммы плотности вероятности распределения напряжений [21]. Предполагается, что в случае разрушения под воздействием сжимающих нагрузок будет наблюдаться хрупкое поведение материала. Поскольку рассматриваемые образцы испытывают в первую очередь сжимающие нагрузки, особое внимание уделено распределению минимальных главных напряжений $\sigma_{\min P_{\text{rinc}}}$. Полученные гистограммы показывают плотность распределения элементов (от общего числа элементов конечно-элементной модели), в которых значение полей минимальных главных напряжений, нормированных относительно предела прочности материала σ_c , равно значению на оси абсцисс.

Для данных гистограмм подобраны аналитические законы распределения, оптимальным образом описывающие распределение полей во всех исследованных структурах. Было выбрано несколько аналитических моделей законов распре-

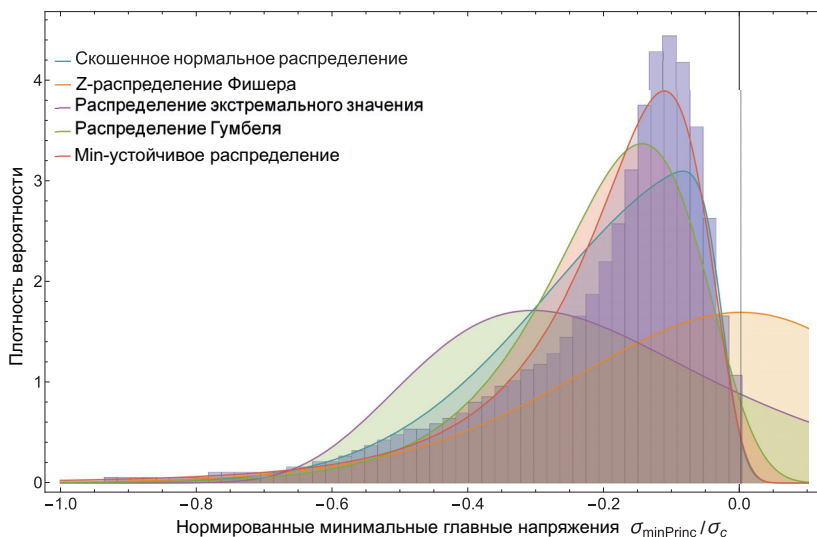


Рис. 6. Сравнение функций плотности вероятности распределения нормированных минимальных главных напряжений для структуры $\phi_{G_{05}}(x, y, z)$ при нагрузке 1 кН.

деления, способных описывать распределения с отрицательными значениями по оси абсцисс. К таким законам относятся скошенное нормальное распределение, Z-распределение Фишера, распределение экстремального значения, распределение Гумбеля и min-устойчивое распределение, также известное как обобщенное распределение минимальных экстремальных значений. На основе исходных данных были подобраны параметры распределений. Сравнение дискретных данных в виде гистограммы распределения и полученных аппроксимирующих функций распределения для структуры $\phi_{G_{05}}(x, y, z)$ представлено на рис. 6.

Наибольшее совпадение между гистограммой распределения и аппроксимирующей функцией наблюдается для обобщенного распределения минимальных экстремальных значений. Данное распределение моделирует асимптотическое поведение минимального значения в выборке и было изначально разработано для объединения поведения других экстремальных значений, таких как распределения Гумбеля, Фреше и Вейбулла. Функция данного распределения имеет следующий вид:

$$f(\sigma_{\minPrinc}) = \left(\xi \frac{\mu - \sigma_{\minPrinc}}{\sigma} + 1 \right)^{-\frac{1+\xi}{\xi}} \exp \left(- \left(\xi \frac{\mu - \sigma_{\minPrinc}}{\sigma} + 1 \right)^{-\frac{1}{\xi}} \right), \quad (7)$$

для $\xi \frac{\mu - \sigma_{\minPrinc}}{\sigma} + 1 > 0$, где σ_{\minPrinc} — данные плотности вероятности распределения минимальных главных напряжений; ξ — параметр формы (действительное число); μ — параметр размещения (действительное число); σ — параметр масштаба (положительное действительное число). Все три параметра подбирались на основе представленных данных распределения минимальных главных напряжений для структуры $\phi_{G_{05}}(x, y, z)$. Полученные характеристики приведены в таблице.

На рис. 7 представлено распределение минимальных главных напряжений для всех исследуемых структур.

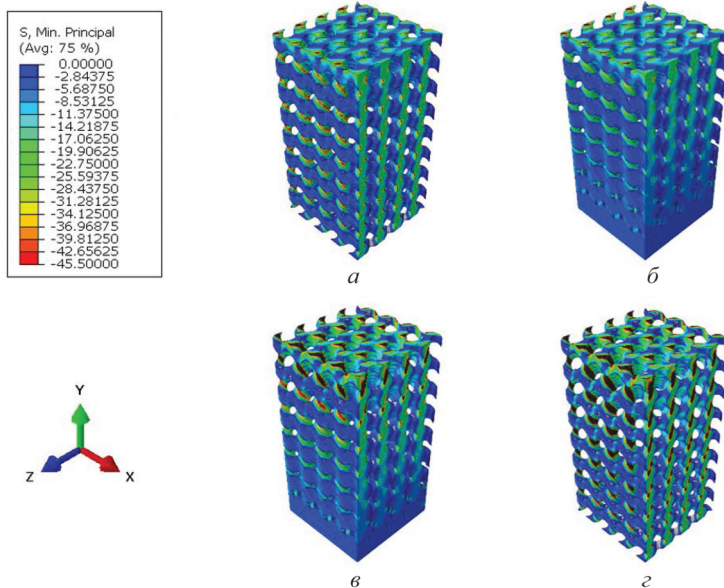


Рис. 7. Распределение минимальных главных напряжений для структур на основе поверхности Шоена G для нагрузки 1 кН: а — однородная структура $\phi_{G_{05}}(x, y, z)$ с пористостью 50%; б — градиентная структура $\phi_{G_{00-05}}(x, y, z)$ с пористостью от 0 до 50%; в — градиентная структура $\phi_{G_{00-07}}(x, y, z)$ с пористостью от 0 до 70%; г — градиентная структура $\phi_{G_{05-07}}(x, y, z)$ с пористостью от 50 до 70%.

Параметры обобщенного распределения минимальных экстремальных значений для описания распределения нормированных напряжений

Параметр	Структуры на основе поверхности Шоена G			
	$\phi_{G_{05}}(x, y, z)$	$\phi_{G_{00-05}}(x, y, z)$	$\phi_{G_{00-07}}(x, y, z)$	$\phi_{G_{05-07}}(x, y, z)$
	Однородная, пористость 50%	Градиентная, пористость от 0 до 50%	Градиентная, пористость от 0 до 70%	Градиентная, пористость от 50 до 70%
Размещение μ	-0.132	-0.102	-0.105	-0.155
Масштаб σ	0.097	0.046	0.060	0.128
Форма ξ	0.232	0.139	0.239	0.327

На рис. 8 сопоставлены плотности вероятности распределений для перечисленных структур для обобщенного распределения минимальных экстремальных значений. Согласно полученным результатам, можно отметить, что при нагружении представленных скаффолдов сжимающей нагрузкой 1 кН в отдельных элементах структур возникают напряжения, превышающие значение предела прочности для заданного материала. В большей степени это касается структуры на основе ТПМП Шоена G с изменением объемной доли пористости от 50 до 70% (рис. 7, г), структуры $\phi_{G_{00-07}}(x, y, z)$ в меньшей — структуры с изменением объемной доли пористости от 0 до 70% и однородной структуры с пористостью 50% от общего объема образца. Вертикальная пунктирная линия на рис. 8 в точке $\sigma_{\min \text{Princ}}/\sigma_c = -1$ обозначает предел, после которого выполняется критерий разрушения по максимальным напряжениям. Соответственно, площадь под графиком плотности распределения слева от данного предела соответствует вероятности разрушения. Таким образом, веро-

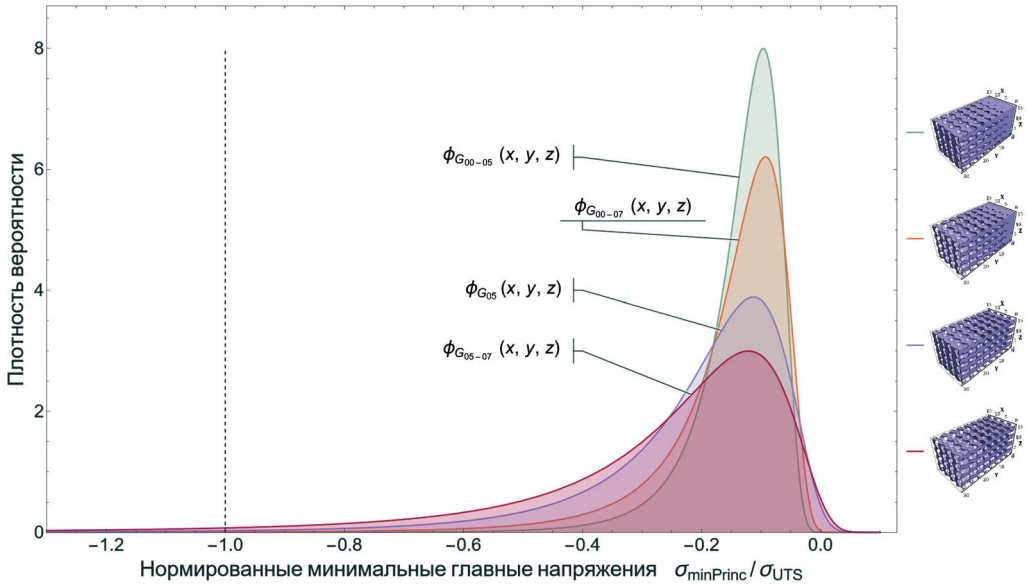


Рис. 8. Плотности вероятности распределения нормированных минимальных главных напряжений для структур на основе ТПМП Шоена G для сжимающей нагрузки 1 кН.

ятность разрушения составляет: 2.98 % — для структуры $\phi_{G_{05-07}}(x, y, z)$, 0.79 % — для структуры $\phi_{G_{05}}(x, y, z)$, 0.19 % — для структуры $\phi_{G_{00-07}}(x, y, z)$ и 0.01 % — для структуры $\phi_{G_{00-05}}(x, y, z)$.

Построены зависимости реакционной силы, возникающей при сжатии структуры, от осевых деформаций для функционально-градиентных структур. Для сравнения также построены зависимости «сила — перемещение» для однородной решетчатой структуры того же типа геометрии и для сплошного образца, габаритные размеры и модель материала которого совпадают с соответствующими параметрами скаффолдов. Была проведена нормализация перемещений всех представленных структур по изменению осевого габарита сплошного образца под воздействием сжимающей нагрузки 1 кН, изменение составило 0.05 мм. Результирующие нормализованные графики для всех исследуемых структур представлены на рис. 9.

Опираясь на полученные данные, можно сделать вывод, что в сравнении со сплошным образцом наиболее податливое поведение демонстрирует структура с функциональным градиентом пористой фазы, изменяющейся от 50 до 70 %. Наиболее жесткое поведение демонстрируют структуры с функциональным градиентом пористой фазы, меняющейся в диапазоне от 0 до 50 %, и чуть более податливое — с градиентом пор от 0 до 70 %. Гораздо более податливое (хотя и более жесткое, чем у структуры $\phi_{G_{05-07}}(x, y, z)$) поведение демонстрирует однородная решетчатая структура с пористостью 50 %.

Для анализа деформационной картины, возникающей в представленных скаффолдах, рассмотрим их распределение на отрезке отдельного элемента структуры, входящего в элементарную ячейку решетки на основе ТПМП Шоена G. Был выбран направляющий отрезок АВ, симметрично пересекающий элемент структуры по диагонали сверху вниз, график результирующих деформаций представлен на рис. 10. Графики предварительно нормализованы по глобальным осевым деформациям.

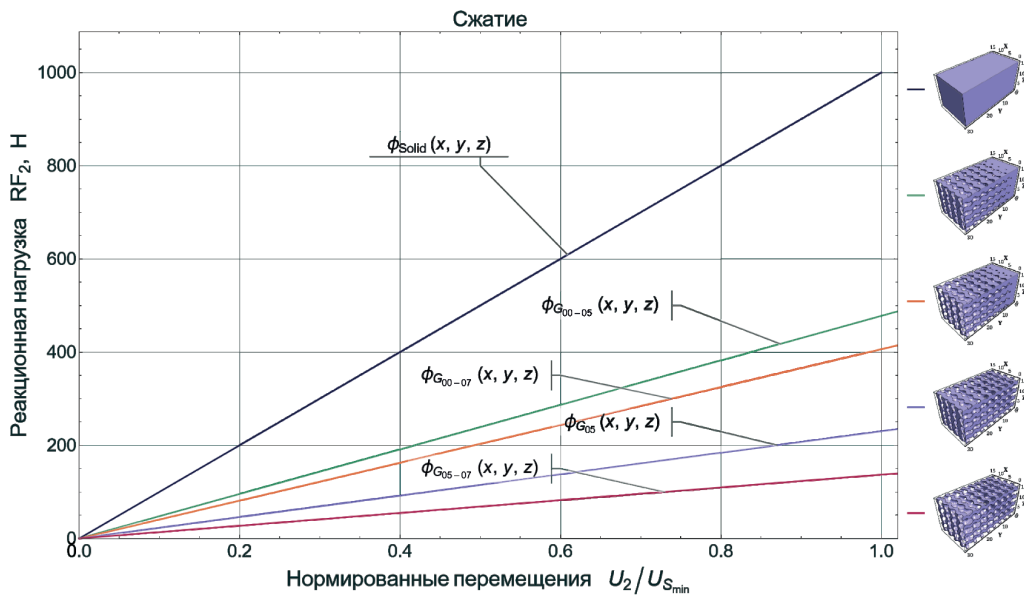


Рис. 9. Зависимость реакционной силы от нормированных перемещений в направлении Y , для сплошного образца, однородной решетчатой структуры и функционально-градиентных структур на основе ТПМП Шоена G при моделировании испытания на сжатие.

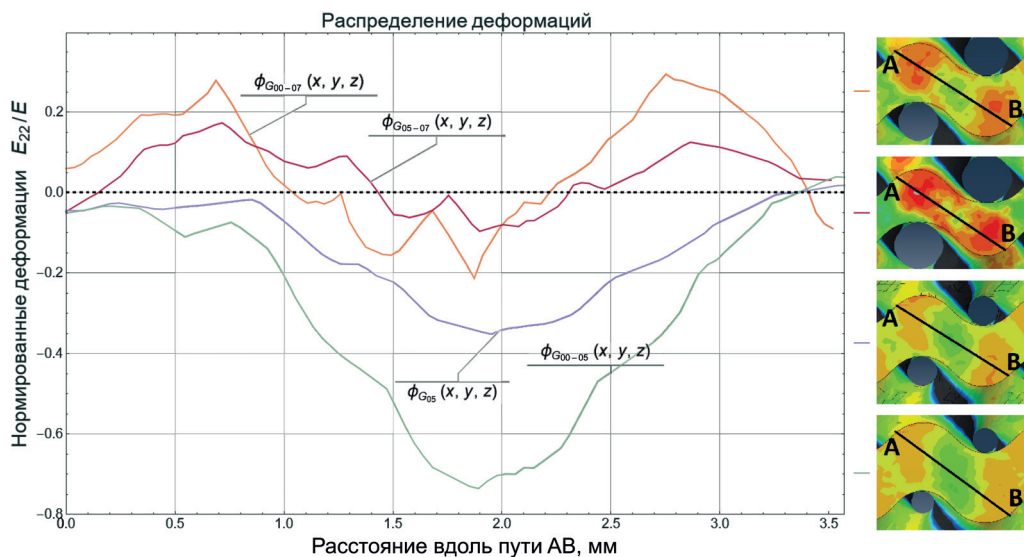


Рис. 10. Распределение осевых деформаций по отрезку, проведенному через элемент элементарной ячейки структуры для сжимающей нагрузки 1 кН.

Минимальные значения относительных деформаций по величине наблюдаются для структур с наименьшей пористостью — это связано с тем, что менее пористые структуры лучше сопротивляются компрессионным нагрузкам. Наибольшие глобальные деформации относительно всей структуры наблюдаются у функционально-градиентной модели, пористая фаза которой изменяется от 0 до 50 %, а также у од-

нородной модели, чья пористость постоянна на протяжении всего объема, — 50%. Локальная деформация элемента в меньшей степени относительно глобальной деформации модели выражена у функционально-градиентной структуры с пористостью от 0 до 70%, а также с пористостью от 50 до 70%. Локальные деформации, больше у структур, пористость которых выше.

6. Заключение. В данном исследовании проведено численное исследование механических свойств и поведение решетчатых функционально-градиентных 3D-печатных пористых структур, выступающих в роли прототипов биомедицинских скаффолдов костной ткани. Для создания геометрических моделей образцов использовались методы, основанные на аналитическом определении трехмерных поверхностей, разделяющих две фазы. Достоверность численных моделей была подтверждена путем сравнения деформационных полей, полученных с использованием теоретической модели и экспериментального анализа с видеосистемой Vic-3D Micro-DIC. Результаты исследования деформационного поведения моделей под действием компрессионных нагрузок представлены в форме статистического распределения напряжений. Проведена оценка влияния функционального градиента на распределение напряжений в структурах в сравнении с однородной решетчатой структурой и сплошным образцом для той же модели материала. Полученные результаты демонстрируют возможность реализации различного механического поведения пористых решетчатых структур путем варьирования градиента пористости.

Литература

1. Afshar M., Anaraki A.P., Montazerian H., Kadkhodapour J. Additive manufacturing and mechanical characterization of graded porosity scaffolds designed based on triply periodic minimal surface architectures *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **62**, 481–494 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2016.05.027>
2. Bracaglia L.G., Smith B., Watson E., Arumugasaamy N., Mikos A.G., Fisher J. 3D printing for the design and fabrication of polymer-based gradient scaffolds. *Acta Biomater.* **56**, 3–13 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2017.03.030>
3. Pagani S., Liverani E., Giavaresi G., De Luca A., Belvedere C., Fortunato A., Leardini A., Fini M., Tomesani L., Caravaggi P. Mechanical and in vitro biological properties of uniform and graded Cobalt-chrome lattice structures in orthopedic implants. *J. Biomed. Mater. Res. Part B Appl. Biomater.* **109** (12), 2091–2103 (2021). <https://doi.org/10.1002/jbm.b.34857>
4. Wang Y., Müller W. D., Rumjahn A., Schmidt F., Schwitalla A. D. Mechanical properties of fused filament fabricated PEEK for biomedical applications depending on additive manufacturing parameters. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **115**, 104250 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2020.104250>
5. Li X., Xiong Y.Z., Zhang H., Gao R.N. Development of functionally graded porous titanium/silk fibroin composite scaffold for bone repair. *Mater. Lett.* **282**, 128670 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.128670>
6. Zhao M., Liu F., Fu G., Zhang D.Z., Zhang T., Zhou H. Improved mechanical properties and energy absorption of BCC lattice structures with triply periodic minimal surfaces fabricated by SLM. *Materials.* **11** (12), 2411 (2018). <https://doi.org/10.3390/ma11122411>
7. Liu F., Mao Z., Zhang P., Zhang D.Z., Jiang J., Ma Z. Functionally graded porous scaffolds in multiple patterns: New design method, physical and mechanical properties. *Mater. Des.* **160**, 849–860 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.09.053>
8. Shi X., Liao W., Liu T., Zhang C., Li D., Jiang W., Wang C., Ren F. Design optimization of multimorphology surface-based lattice structures with density gradients. *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* **117**, 2013–2028 (2021). <https://doi.org/10.1007/s00170-021-07175-3>
9. Bargmann S., Klusemann B., Markmann J., Schnabel J.E., Schneider K., Soyarslan C., Wilmers J. Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review. *Prog. Mater. Sci.* **96**, 322–384 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.02.003>

10. Han C., Li Y., Wang Q., Wen S., Wei Q., Yan C., Hao L., Liu J., Shi Y. Continuous functionally graded porous titanium scaffolds manufactured by selective laser melting for bone implants. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **80**, 119–127 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.01.013>
11. Ng J.L., Collins C.E., Knothe Tate M.L. Engineering mechanical gradients in next generation biomaterials — Lessons learned from medical textile design. *Acta Biomater.* **56**, 14–24 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2017.03.004>
12. Zhang X. Y., Fang G., Leeflang S., Zadpoor A. A., Zhou J. Topological design, permeability and mechanical behavior of additively manufactured functionally graded porous metallic biomaterials. *Acta Biomater.* **84**, 437–452 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2018.12.013>
13. Moetazedian A., Gleadall A., Han X., Silberschmidt V. V. Effect of environment on mechanical properties of 3D printed polylactide for biomedical applications. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **102**, 103510 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2019.103510>
14. Ruiz-Cantu L., Gleadall A., Faris C., Segal J., Shakesheff K., Yang J. Multi-material 3D bio-printing of porous constructs for cartilage regeneration. *Mater. Sci. Eng. C, Mater. Bio. Appl.* **109**, 110578 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.110578>
15. Wang X., Xu S., Zhou S., Xu W., Leary M., Choong P., Qian M., Brandt M., Xie Y.M. Topological design and additive manufacturing of porous metals for bone scaffolds and orthopaedic implants: A review. *Biomaterials* **83**, 127–141 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2016.01.012>
16. Wang Z., Wang Y., Yan J., Zhang K., Lin F., Xiang L., Deng L., Guan Z., Cui W., Zhang H. Pharmaceutical electrospinning and 3D printing scaffold design for bone regeneration. *Adv. Drug Deliv. Rev.* **174**, 504–534 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.addr.2021.05.007>
17. Shah R., Gashi B., Hoque S., Marian M., Rosenkranz A. Enhancing mechanical and biomedical properties of prostheses — Surface and material design. *Surfaces and Interfaces* **27**, 101498 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101498>
18. Entezari A., Zhang Z., Sue A., Sun G., Huo X., Chang C. C., Zhou S., Swain M. V., Li Q. Nondestructive characterization of bone tissue scaffolds for clinical scenarios. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **89**, 150–161 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.08.034>
19. Razi H., Checa S., Schaser K.D., Duda G.N. Shaping scaffold structures in rapid manufacturing implants: A modeling approach toward mechano-biologically optimized configurations for large bone defect. *J. Biomed. Mater. Res. Part B Appl. Biomater.* **100** B, 1736–1745 (2012). <https://doi.org/10.1002/jbm.b.32740>
20. Zhang L., Song B., Yang L., Shi Y. Tailored mechanical response and mass transport characteristic of selective laser melted porous metallic biomaterials for bone scaffolds. *Acta Biomater.* **112**, 298–315 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2020.05.038>
21. Tashkinov M.A. Multipoint stochastic approach to localization of microscale elastic behavior of random heterogeneous media. *Comput. Struct.* **249**, 106474 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2020.106474>

Статья поступила в редакцию 30 марта 2022 г.;
доработана 23 мая 2022 г.;
рекомендована к печати 9 июня 2022 г.

Контактная информация:

Еленская Наталья Витальевна — ассистент, мл. науч. сотр.; n.elenskaya@pstu.ru
Ташкинов Михаил Анатольевич — канд. физ.-мат. наук, доц., вед. науч. сотр.;
m.tashkinov@pstu.ru
Зильбершмидт Вадим Владимирович — канд. физ.-мат. наук, проф.;
v.silberschmidt@lboro.ac.uk

Numerical modelling of the deformation behaviour of polymer lattice structures with density gradient based on additive technologies*

N. V. Elenskaya¹, M. A. Tashkinov¹, V. V. Silberschmidt²

¹ Perm National Research Polytechnic University,
29, Komsomolsky pr., Perm, 614990, Russian Federation

² Loughborough University, Epinal Way, Loughborough, LE11 3TU, United Kingdom

For citation: Elenskaya N. V., Tashkinov M. A., Silberschmidt V. V. Numerical modelling of the deformation behaviour of polymer lattice structures with density gradient based on additive technologies. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 4, pp. 679–692. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.410> (In Russian)

The mechanical behavior of gradient lattice structures whose geometry is based on the analytic definition of three-dimensional triply periodic minimal surfaces (TPMS) is investigated. Several homogeneous and gradient lattice models with different types of representative volume geometry and gradient parameters are considered. The numerical models are validated with data obtained experimentally using the Vic-3D video system. The results of numerical simulation of the deformation behaviour of gradient structures with the Shoen G (gyroid) TPMP geometry under uniaxial compression are presented. The influence of structure parameters and gradient properties on the mechanical behaviour is studied.

Keywords: triply periodic minimal surfaces, two-phase structures, finite element method, functional gradient, microstructure.

References

1. Afshar M., Anaraki A.P., Montazerian H., Kadkhodapour J. Additive manufacturing and mechanical characterization of graded porosity scaffolds designed based on triply periodic minimal surface architectures *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **62**, 481–494 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2016.05.027>
2. Bracaglia L.G., Smith B., Watson E., Arumugasaamy N., Mikos A.G., Fisher J. 3D printing for the design and fabrication of polymer-based gradient scaffolds. *Acta Biomater.* **56**, 3–13 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2017.03.030>
3. Pagani S., Liverani E., Giavaresi G., De Luca A., Belvedere C., Fortunato A., Leardini A., Fini M., Tomesani L., Caravaggi P. Mechanical and in vitro biological properties of uniform and graded Cobalt-chrome lattice structures in orthopedic implants. *J. Biomed. Mater. Res. Part B Appl. Biomater.* **109** (12), 2091–2103 (2021). <https://doi.org/10.1002/jbm.b.34857>
4. Wang Y., Müller W. D., Rumjahn A., Schmidt F., Schwitalla A. D. Mechanical properties of fused filament fabricated PEEK for biomedical applications depending on additive manufacturing parameters. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **115**, 104250 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2020.104250>
5. Li X., Xiong Y.Z., Zhang H., Gao R.N. Development of functionally graded porous titanium/silk fibroin composite scaffold for bone repair. *Mater. Lett.* **282**, 128670 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.128670>
6. Zhao M., Liu F., Fu G., Zhang D.Z., Zhang T., Zhou H. Improved mechanical properties and energy absorption of BCC lattice structures with triply periodic minimal surfaces fabricated by SLM. *Materials.* **11** (12), 2411 (2018). <https://doi.org/10.3390/ma11122411>
7. Liu F., Mao Z., Zhang P., Zhang D.Z., Jiang J., Ma Z. Functionally graded porous scaffolds in multiple patterns: New design method, physical and mechanical properties. *Mater. Des.* **160**, 849–860 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.09.053>
8. Shi X., Liao W., Liu T., Zhang C., Li D., Jiang W., Wang C., Ren F. Design optimization of multimorphology surface-based lattice structures with density gradients. *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* **117**, 2013–2028 (2021). <https://doi.org/10.1007/s00170-021-07175-3>

*The authors gratefully acknowledge financial support from the mega-grant international cooperation program, contract no. 075-15-2021-578 of May 31, 2021, hosted by Perm National Research Polytechnic University.

9. Bargmann S., Klusemann B., Markmann J., Schnabel J.E., Schneider K., Soyarslan C., Wilmers J. Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review. *Prog. Mater. Sci.* **96**, 322–384 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.02.003>
10. Han C., Li Y., Wang Q., Wen S., Wei Q., Yan C., Hao L., Liu J., Shi Y. Continuous functionally graded porous titanium scaffolds manufactured by selective laser melting for bone implants. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **80**, 119–127 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.01.013>
11. Ng J.L., Collins C.E., Knothe Tate M.L. Engineering mechanical gradients in next generation biomaterials — Lessons learned from medical textile design. *Acta Biomater.* **56**, 14–24 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2017.03.004>
12. Zhang X. Y., Fang G., Leeftang S., Zadpoor A. A., Zhou J. Topological design, permeability and mechanical behavior of additively manufactured functionally graded porous metallic biomaterials. *Acta Biomater.* **84**, 437–452 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2018.12.013>
13. Moetazedian A., Gleadall A., Han X., Silberschmidt V. V. Effect of environment on mechanical properties of 3D printed polylactide for biomedical applications. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **102**, 103510 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2019.103510>
14. Ruiz-Cantu L., Gleadall A., Faris C., Segal J., Shakesheff K., Yang J. Multi-material 3D bio-printing of porous constructs for cartilage regeneration. *Mater. Sci. Eng. C, Mater. Bio. Appl.* **109**, 110578 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.msec.2019.110578>
15. Wang X., Xu S., Zhou S., Xu W., Leary M., Choong P., Qian M., Brandt M., Xie Y. M. Topological design and additive manufacturing of porous metals for bone scaffolds and orthopaedic implants: A review. *Biomaterials* **83**, 127–141 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2016.01.012>
16. Wang Z., Wang Y., Yan J., Zhang K., Lin F., Xiang L., Deng L., Guan Z., Cui W., Zhang H. Pharmaceutical electrospinning and 3D printing scaffold design for bone regeneration. *Adv. Drug Deliv. Rev.* **174**, 504–534 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.addr.2021.05.007>
17. Shah R., Gashi B., Hoque S., Marian M., Rosenkranz A. Enhancing mechanical and biomedical properties of prostheses — Surface and material design. *Surfaces and Interfaces.* **27**, 101498 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101498>
18. Entezari A., Zhang Z., Sue A., Sun G., Huo X., Chang C. C., Zhou S., Swain M. V., Li Q. Nondestructive characterization of bone tissue scaffolds for clinical scenarios. *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **89**, 150–161 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.08.034>
19. Razi H., Checa S., Schaser K. D., Duda G. N. Shaping scaffold structures in rapid manufacturing implants: A modeling approach toward mechano-biologically optimized configurations for large bone defect. *J. Biomed. Mater. Res. Part B Appl. Biomater.* **100** B, 1736–1745 (2012). <https://doi.org/10.1002/jbm.b.32740>
20. Zhang L., Song B., Yang L., Shi Y. Tailored mechanical response and mass transport characteristic of selective laser melted porous metallic biomaterials for bone scaffolds. *Acta Biomater.* **112**, 298–315 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2020.05.038>
21. Tashkinov M. A. Multipoint stochastic approach to localization of microscale elastic behavior of random heterogeneous media. *Comput. Struct.* **249**, 106474 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2020.106474>

Received: March 30, 2022

Revised: May 23, 2022

Accepted: June 9, 2022

Authors' information:

Nataliya V. Elenskaya — n.elenskaya@pstu.ru

Mikhail A. Tashkinov — m.tashkinov@pstu.ru

Vadim V. Silberschmidt — v.silberschmidt@lboro.ac.uk