

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИПЕРУПРУГИХ КОМПОЗИТОВ С МАЛЫМИ ДОБАВКАМИ ДИСПЕРСНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ. МАСШТАБНЫЕ ЭФФЕКТЫ В НАНОКОМПОЗИТАХ

Волков-Богородский Д.Б., Власов А.Н.

РАН, г. Москва, Россия

В настоящей работе развивается параметрический метод асимптотического усреднения для моделирования гиперупругих композитов с малыми добавками дисперсных наполнителей. Исследуются масштабные эффекты усиления нанокompозитов (на основе полимерной и металлической матрицы) при использовании наполнителей наноразмерного уровня. Эффекты усиления объясняются наличием развитой промежуточной контактной зоны (межфазного слоя) на границе между матрицей и нановключениями. Для эффективного решения вспомогательных задач для функций быстрых переменных, возникающих в методе асимптотического усреднения, в программном комплексе Abaqus развиваются конечно-элементные и аналитические методы, учитывающие особенности постановки задачи на ячейке периодичности с учетом межфазных взаимодействий.

Композитные материалы с дисперсным наполнителем

В работе исследуются эффективные механические свойства композитных материалов на основе гиперупругой полимерной матрицы и дисперсного наполнителя, имеющего размеры, которые могут относиться к разным масштабным уровням – к микронному, субмикронному или наноразмерному. Субмикронный и наноразмерный масштаб наполнителя (микро- и нанотрубки) характеризуется наличием развитого межфазного слоя, который может приводить уже при малых добавках наполнителя к значительному эффекту усиления жесткостных характеристик композитных материалов [1, 2], не учитываемому в классических теориях оценки эффективных характеристик структурно-неоднородных материалов.

Аналогичные масштабные эффекты усиления наблюдаются и в материалах других типов (не обязательно на основе гиперупругой матрицы) – в металлокомпозитах на основе алюминиевой матрицы, в композитах на основе керамической матрицы; здесь в качестве наполнителя используются оксидные порошки или углеродные нанотрубки [3, 4]. Для металлокомпозитов эффекты усиления проявляются уже при сверхмалых (0.01%) объемных долях наполнителя, имеющего наноразмерный уровень (30 нм).

В настоящей работе для исследования таких масштабных эффектов развивается вариант метода асимптотического усреднения уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами – параметрический метод асимптотического усреднения [5-8] на основе специальных систем функций, учитывающих наличие в микроструктуре композита промежуточного межфазного слоя. Этот метод позволяет описывать материалы с геометрически нелинейной матрицей и упругим наполнителем, имеющим внутреннюю микроструктуру, обусловленную наличием периодической системы включений с промежуточным межфазным слоем, и нелинейную диаграмму зависимости от внешних факторов (температуры, напряженно-деформированного состояния).

Метод асимптотического усреднения является обоснованным и адекватным методом для моделирования физических процессов в структурно-неоднородных средах как с периодической [5, 6], так и с произвольной нерегулярной структурой [7]. Традиционная схема метода асимптотического усреднения была несколько модифицирована в [8] и сформулирована для физически нелинейных уравнений термоупругости за счет расширенной трактовки функций быстрых переменных в параметрическом пространстве.

В отличие от традиционного подхода к методу асимптотического усреднения, помимо двух типов переменных – быстрых и медленных – при асимптотическом анализе уравнений вводится еще дополнительный набор параметров, соответствующий нелинейным зависимостям свойств материала от напряжений, температуры и деформаций. Соответственно функции быстрых переменных рассматриваются в параметрическом пространстве. В результате эффективные характеристики структурно-неоднородного материала имеют нелинейную диаграмму состояния, для расчета которой требуется эффективный метод решения задачи на ячейке периодичности при множественном варьировании дополнительного набора параметров.

Основным уравнением в методе асимптотического усреднения является задача для функций быстрых переменных на ячейке периодичности (первого порядка). Она определяет эффективные характеристики композитного материала и внутренние микронапряжения в окрестности включений, которые нужны для определения прочностных характеристик гиперупругого композита. Специфика параметрического метода асимптотического усреднения для геометрически нелинейных материалов заключается в необходимости решать задачу на ячейке с включениями для такого же геометрически нелинейного материала, но с переменным периодом, который является в данном случае параметром и связан с общей деформацией ячейки.

Масштабные эффекты, обусловленные наличием межфазного слоя, моделируются непосредственно, путём введения в модель промежуточного межфазного сферического слоя для включений сферической формы (рис. 1). Параметры межфазного слоя варьируются в соответствии с размерами включений на основе экспериментальных данных. В работе [2] на основе метода асимптотического усреднения для классической модели упругого материала со сферическими включениями и изменяющимся в зависимости от размера включений межфазным слоем был смоделирован численно масштабный эффект локального усиления жесткостных характеристик композитного материала, хорошо согласующийся с экспериментальными данными.

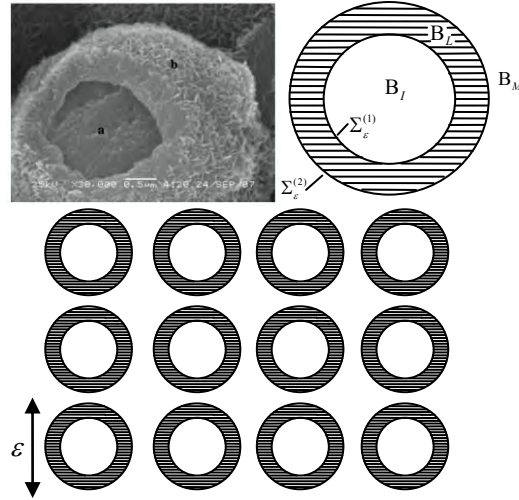


Рис. 1 - Модель композитного материала с усложненной внутренней микроструктурой

Для металлокомпозитов на основе алюминиевой матрицы, модифицированной оксидными включениями наноразмерного уровня со сверхмалым объемным содержанием частиц предлагается модель, которая учитывает влияние большой удельной поверхности дисперсно распределенных наночастиц за счет развитого межфазного слоя. Эта модель позволяет учесть эффекты локализации межфазных слоев около включений, влияние «адгезионного» упрочнения межфазного слоя и процессы образования кластеров в результате агрегирования наночастиц при повышении объемной доли их содержания.

Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами

Рассматриваются уравнения термоупругости с физически нелинейным материалом [8]:

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl}(x/\varepsilon, T)(\varepsilon_{kl} - T \alpha_{kl}(x/\varepsilon, T)), \quad (1)$$

$$Q_i = -\kappa_{ij}(x/\varepsilon, T) \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad (2)$$

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{klij}, \quad \alpha_{ij} = \alpha_{ji}, \quad \kappa_{ij} = \kappa_{ji}.$$

В соответствии со структурой определяющих соотношений (1), (2) в неоднородном материале (рис. 1) введем «быстрые» и «медленные» переменные, связанные операцией дифференцирования сложной функции, и набор параметров, определяющий все нелинейные зависимости в соотношениях (1), (2):

$$\xi = x/\varepsilon, \quad x = (x_1, x_2, x_3), \quad \frac{\partial}{\partial x_k} = \varepsilon^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_k} + D^k, \quad D^k = \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad \mathbf{p} = \{T\}. \quad (3)$$

Уравнения равновесия для (1), (2) переписываются в дивергентном виде с матричными коэффициентами, зависящими от быстрых переменных и набора параметров:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \alpha_j T \right) \right) + \mathbf{F} = 0, \quad (4)$$

$$\rho(\xi) c(\xi) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + h, \quad (5)$$

$$A_{ij} = \{a_{ijkl}\}, \quad a_{ijkl} = c_{ijkl}, \quad \alpha_i = \{\alpha_{ij}\}, \quad \mathbf{u} = \{u_i\}, \quad \mathbf{F} = \{F_i\}.$$

Контактные условия (в данном случае – условия идеального контакта) также переписываются в дивергентном виде с матричными коэффициентами:

$$[\mathbf{u}] = \left[A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} - \alpha_j T \right) n_i \right] = 0, \quad [T] = \left[\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial T}{\partial x_j} n_i \right] = 0. \quad (6)$$

Решение уравнений (4) – (6) в периодической среде с размером ячейки периодичности ε ищется в виде асимптотических разложений по функциям быстрых и медленных переменных:

$$\mathbf{u}(x) = \hat{\mathbf{u}}(x, \xi, \mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l \mathbf{u}^{(l)}(x, \xi, \mathbf{p}), \quad (7)$$

$$T(x) = \hat{T}(x, \xi, \mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} \varepsilon^l T^{(l)}(x, \xi, \mathbf{p}). \quad (8)$$

При этом по быстрым переменным выполняется условие периодичности с периодом равным 1, поскольку материальные коэффициенты в определяющих уравнениях (1), (2) при фиксированном \mathbf{p} фактически зависят только от ξ и являются периодическими. Таким образом, для анализа уравнений (4) – (6) применяется асимптотический анализ как вариант метода многих масштабов.

Быстрые и медленные переменные разделяются в процессе построения асимптотики с помощью формулы дифференцирования зависимых переменных (3); при этом уравнения (4) – (6) преобразуются в свои асимптотические ряды. Необходимое условие равенства нулю (4) – (6) с точностью до членов порядка $O(\varepsilon)$ определяет структуру асимптотических разложений (7), (8) первого порядка:

$$\mathbf{u}^{(0)}(x, \xi, \mathbf{p}) = \mathbf{V}(x), \quad T^{(0)}(x, \xi, \mathbf{p}) = T_0(x), \quad (9)$$

$$\mathbf{u}^{(1)}(x, \xi, \mathbf{p}) = N_{i_1}(\xi, \mathbf{p}) D^{i_1} \mathbf{V}(x) + \mathbf{m}(\xi, \mathbf{p}) T_0(x), \quad (10)$$

$$T^{(1)}(x, \xi, \mathbf{p}) = n_{i_1}(\xi, \mathbf{p}) D^{i_1} T_0(x). \quad (11)$$

Здесь $N_{i_1}(\xi, \mathbf{p})$, $\mathbf{m}(\xi, \mathbf{p})$ и $n_{i_1}(\xi, \mathbf{p})$ функции быстрых переменных в параметрическом пространстве (соответственно матричные, векторные и скалярные), периодические с периодом 1.

Форма представления (9) предопределяет равенство нулю членов порядка $O(\varepsilon^{-2})$, а форма представления (10), (11) определяет уравнения для функций быстрых переменных в классе периодических функций из условия равенства нулю членов порядка $O(\varepsilon^{-1})$:

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (N_{i_1} + \xi_{i_1} E)}{\partial \xi_j} \right) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi_j} - \alpha_j \right) \right) = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (n_{i_1} + \xi_{i_1})}{\partial \xi_j} \right) = 0. \quad (13)$$

Из граничных условий на межфазных поверхностях аналогично получаем контактные условия для функций быстрых переменных (в случае идеального контакта):

$$[N_{i_1}] = \left[A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (N_{i_1} + \xi_{i_1} E)}{\partial \xi_j} n_i \right] = 0, \quad [\mathbf{m}] = \left[A_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi_j} n_i \right] = 0, \quad (14)$$

$$[n_{i_1}] = \left[\kappa_{ij}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial (n_{i_1} + \xi_{i_1})}{\partial \xi_j} n_i \right] = 0. \quad (15)$$

Требование разрешимости возникающих на каждом шаге уравнений для периодических функций быстрых переменных приводит к необходимости “усреднения” по периоду всех членов асимптотического равенства в разложении уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами. В результате для функций медленных переменных $\mathbf{V}(x)$ и $T_0(x)$ получается асимптотическое уравнение, в котором все члены, зависящие от быстрых переменных, заменяются их средними по периоду:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(N_j + \xi_j E)}{\partial \xi_k} \right\rangle \frac{\partial V}{\partial x_j} + \right. \\ \left. + \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi_k} - \boldsymbol{\alpha}_k \right) \right\rangle T_0 \right\rangle + \langle \mathbf{F} \rangle = 0, \quad (16)$$

$$\langle \rho(\xi) c(\xi) \rangle \frac{\partial T_0}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \left\langle \kappa_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(n_j + \xi_j)}{\partial \xi_k} \right\rangle \frac{\partial T_0}{\partial x_j} \right\rangle + \langle h \rangle. \quad (17)$$

Здесь $\langle m \rangle$ означает среднее значение по объему представительной ячейки (среднее по периоду):

$$\langle m(\xi) \rangle = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 m(\xi) d\xi.$$

Форма представления уравнений (16), (17) имеет вид усредненных уравнений термоупругости с эффективными термомеханическими характеристиками, определяемыми функциями быстрых переменных в параметрическом пространстве:

$$\hat{A}_{ij} = \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(N_j + \xi_j E)}{\partial \xi_k} \right\rangle, \quad \hat{\boldsymbol{\alpha}}_j = -\hat{A}_{ij}^{-1} \left\langle A_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \xi_k} - \boldsymbol{\alpha}_k \right) \right\rangle, \quad (18)$$

$$\hat{\kappa}_{ij} = \left\langle \kappa_{ik}(\xi, \mathbf{p}) \frac{\partial(n_j + \xi_j)}{\partial \xi_k} \right\rangle, \quad \hat{C} = \langle \rho(\xi) c(\xi) \rangle. \quad (19)$$

Здесь $\hat{A}_{ij} = \{\hat{a}_{ijkl}\}$ – эффективная матрица упругости структурно-неоднородного материала, $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_j = \{\hat{\alpha}_{ij}\}$ – эффективный тензор теплового расширения, $\hat{\kappa}_{ij}$ – эффективный тензор теплопроводности, \hat{C} – эффективная теплоемкость структурно-неоднородного материала. Уравнения (18), (19) вместе с (12) – (15) определяют численный алгоритм нахождения эффективных характеристик композитного материала. В этих характеристиках сохраняется зависимость от параметра \mathbf{p} , поэтому формулы (18), (19) определяют алгоритм нахождения нелинейной диаграммы состояния эффективного материала.

Разделение быстрых и медленных переменных, формализованное в уравнениях (12) – (15) и (16), (17) представляет собой, по сути, двухуровневую схему решения задач термоупругости для неоднородных материалов с дисперсным наполнителем и периодической структурой. На первом этапе решается задача для функций быстрых переменных, и определяются эффективные характеристики периодической среды. На втором этапе решается полноценная задача термоупругости с нелинейными характеристиками. Каждая из этих задач имеет свою специфику, и решается разным набором численных методов.

Для решения внутренней задачи (12) – (15) в классе периодических функций быстрых переменных, развивается специальный аналитический метод, основанный на точных аппроксимациях решения в подобластях-блоках (метод ВСМ – Block Computational Method) [9 – 12].

Расчет задачи на ячейке методом конечных элементов в Abaqus

Конечно-элементный расчет в Abaqus позволяет подключать широкий спектр различных нелинейных моделей материалов, однако требует большой подготовительной работы при построении численной модели задачи на ячейке для функций быстрых переменных.

В качестве модели гиперупругого материала на основе бутадиен-стирольного каучука использовалась обобщенная модель Муни-Ривлина, в которой упругий потенциал эластомерной матрицы в виде квадратичного соотношения от первого и второго инвариантов деформации:

$$U = C_1(I_1 - 3) + C_2(I_2 - 3) + C_3(I_1 - 3)^2 + C_4(I_2 - 3)^2. \quad (20)$$

Параметры в (20) определялись путем квадратичной аппроксимации обширных экспериментальных данных, полученных в ИПРИМ РАН. В результате упругий потенциал эластомерной матрицы, представляющей собой бутадиен-стирольный каучук, соответствовал обобщенной модели Муни-Ривлина (20) с коэффициентами $C_1 = 0,20049 \text{ МПа}$, $C_2 = 0,07162 \text{ МПа}$, $C_3 = 0,00057 \text{ МПа}$, $C_4 = -0,03148 \text{ МПа}$.

На рис. 2 представлено сравнение результатов экспериментальных исследований на одноосное растяжения и графика зависимости напряжения от относительного удлинения при одноосном растяжении, полученного с использованием обобщенной модели Муни-Ривлина (20). Точность аппроксимации была высокой и не превышала точности экспериментальных исследований.

Наполнитель матрицы (наношунгит) и контактный слой моделировались упругим материалом с модулем Юнга соответственно $E_f = 1.5$ ГПа и $E_L = 1.0$ ГПа и коэффициентом Пуассона $\nu_f = \nu_L = 0.3$. Наполнитель моделировался шаровым включением, а межфазная контактная зона – сферическим слоем (рис. 1).

Толщину межфазного слоя определяли в соответствии с зависимостью [13]:

$$l = l_0 C_\infty \left(\frac{R}{l_0 C_\infty} \right)^{2(d-d_f)/d} \quad (21)$$

где l_0 – длина скелетной связи основной цепи, C_∞ – кинетическая гибкость полимерной молекулярной цепи, $d = 3$ – размерность пространства, d_f – хаусдорфова (фрактальная) размерность поверхности наполнителя.

Фрактальная размерность, в соответствии с экспериментальными данными, принималась равной $d_f = 2.568$. Остальные константы в зависимости (2), определяющие толщину межфазного слоя композита с бутадиен-стирольной матрицей, наполненной шунгитом, принимали равными $C_\infty = 12.5$, $l_0 = 1.54$ нм, $C_\infty^l = 3.58$ [1].

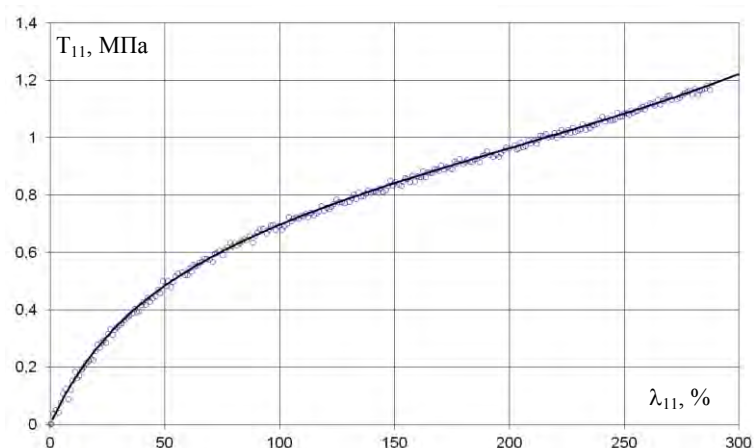


Рис. 2 - Одноосное растяжение бутадиен-стирольного каучука:
 ○ – результаты экспериментов
 – – аппроксимирующая кривая

Задача определения эффективных параметров упругого потенциала эластомерного композитного материала решалась в объёмной постановке с объёмной долей наполнения шунгитом 2.5%.

Из анализа задачи по определению упругого потенциала эластомерного композита следует, что необходимо решить задачу об одноосном растяжении ячейки для симметрично расположенных включений сферической формы, при сохранении параллельности боковых граней, а в качестве расчётной области можно взять 1/8 часть ячейки.

Чтобы обеспечить необходимое условие параллельности граней, расчётная область была расширена до 7 ячеек в направлении осей x, y , ортогональных направлению одноосного растяжения z , и на крайних боковых гранях условие периодичности было заменено условием отсутствия поверхностных сил. Далее, все необходимые данные для вычисления эффективных параметров упругого потенциала эластомерного композита определялись на центральной ячейке. Соответствующие расчётные схемы представлены на рис. 3.

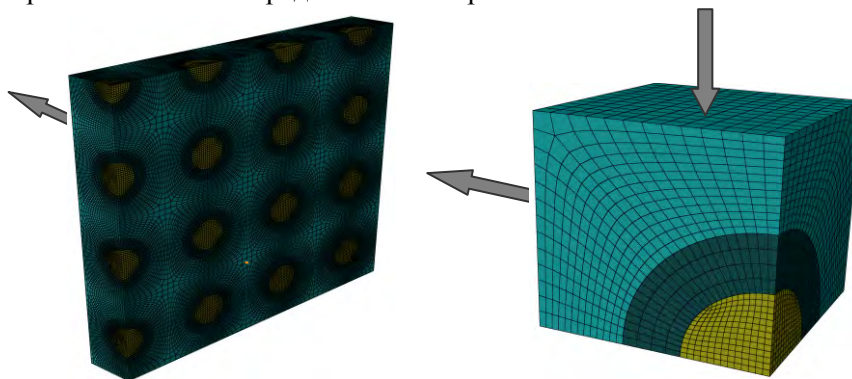


Рис. 3 - Расчётная схема для вычисления эффективного модуля Юнга

В соответствии с изложенной схемой были проведены расчёты эффективных параметров

обобщённого упругого потенциала Муни-Ривлина гиперупругих полимерных нано- и микронаполненных композитов и средних растягивающих напряжений \hat{T}_{11} в зависимости от относительного удлинения ячейки λ_{11} .

В графическом виде результаты расчётов напряжение - относительное удлинение при одноосном растяжении представлены на рис. 4.

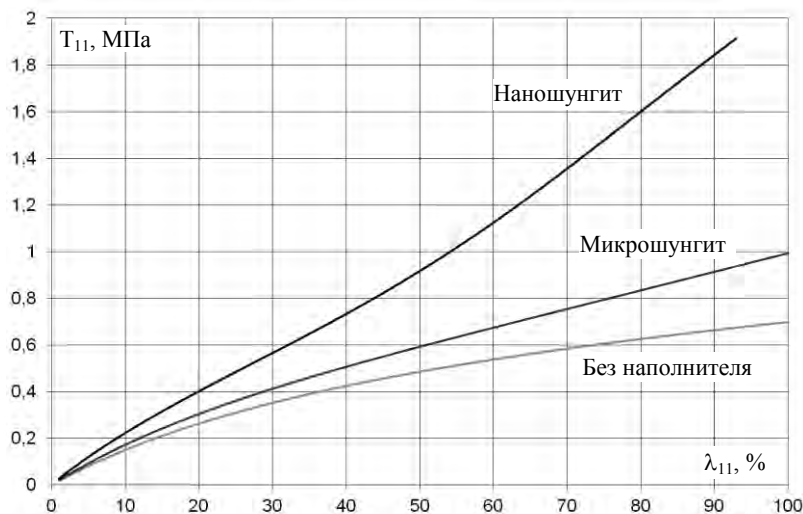


Рис. 4 - Диаграмма напряжений при одноосном растяжении эластомерного композита с дисперсным наполнителем

Результаты расчётов показали, что для эластомерных композитных материалов при малой доле наполнения, при уменьшении размера частиц наполнителя с сохранением объёмной доли наполнителя в матрице, наблюдается эффект усиления. При этом механические свойства таких композитов существенно зависят от размеров включений области.

В заключение отметим, что предложенный метод оценки свойств гиперупругих полимерных композитных материалов описывает эффект усиления при уменьшении размеров частиц наполнителя от микрогабаритного до наногабаритного уровня.

Аналитический метод решения задачи на ячейке

Для задачи на ячейке (12), (13) применяется дополнительный анализ исходных уравнений термоупругости с помощью теоремы Гельмгольца о представлении векторного поля в виде суперпозиции градиента скалярного и ротора векторного потенциала. По результатам этого анализа решение представляется через вспомогательные потенциалы (векторные и скалярные), удовлетворяющие уравнениям Лапласа и Пуассона. Это позволяет применить для всех уравнений один и тот же алгоритм удовлетворения контактных условий на межфазных границах с помощью радиальных множителей $\chi(r)$ – функций, зависящих от сферической радиальной координаты, и построить полную систему функций, удовлетворяющую необходимым контактным условиям, и применяемую для решения задачи на ячейке в аналитическом виде путем разложения вспомогательных потенциалов в сходящийся ряд.

Таким образом, общее решение однородного уравнения Ляме (для изотропного материала) может быть представлено через вспомогательные потенциалы в следующем виде:

$$U(P) = \frac{f_0(P)}{\mu} + \frac{\nabla(\phi_0 - r f_0)}{4\mu(1-\nu)}, \quad \nabla^2 f_0(P) + F = 0, \quad \nabla^2 \phi_0(P) + rF = 0. \quad (22)$$

Здесь P – точка в пространстве, r – радиус-вектор из начала координат в точку P , F – объёмные силы в теле, f_0 – векторный потенциал, ϕ_0 – скалярный потенциал (при отсутствии объёмных сил это гармонические функции), μ – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона материала.

Аналогично стационарное уравнение теплопроводности описывается уравнением $\nabla^2 \Phi(P) + h = 0$. Таким образом, интересные нас модели изотропной теории упругости (в том числе и модель изотропной теплопроводности) описываются единообразно с помощью вспомогательных потенциалов ϕ_0 , f_0 и Φ , удовлетворяющих уравнению Лапласа или Пуассона (22).

Критерием отбора для аппроксимирующей цепочки задач на ячейке системы функций является возможность точного аналитического решения (в конечном виде) обобщенной задачи Эшелби для уединенного включения с промежуточным слоем при условии полиномиального роста решения на бесконечности и выполнении необходимых контактных условий на межфазных границах. Такие

системы функций были построены и реализованы методом радиальных множителей (см. [14 – 16]) для включений сфероидальной, сферической и цилиндрической формы.

Полиномиальная асимптотика на бесконечности в уравнениях (1) – (4) для обобщенной задачи Эшелби при отсутствии объемных сил определяется некоторым гармоническим полиномом $f_n^{(0)}(P)$ степени n (в уравнении (4) рассматривается полиномиальная асимптотика только для давления p).

Отдельные степени свободы в полиноме $f_n^{(0)}$ задаются системой комплекснозначных гармонических полиномов $\Phi_n^m(P)$, $P = (x, y, z)$, определяемых рядом конечной длины с помощью метода квазиразделения переменных:

$$\Phi_n^m(P) = \sum_p \frac{(-1)^p \bar{w}^p}{4^p p!} \psi_0^{(-p)}(w) U_0^{(2p)}(z), \quad \psi_0 = w^m, \quad U_0 = z^{n-m}, \quad w = x + iy. \quad (23)$$

Суть метода радиальных множителей заключается в том, что на основе (23) с помощью регулярных и сингулярных функций χ_n и $\hat{\chi}_n$, зависящих от радиальной координаты, строятся системы базисных потенциалов для аппроксимации функций ϕ_0 , f_0 , Φ в уравнениях (22). А затем предлагается явная конструкция решения на основе базисных потенциалов в подобластях B_I , B_L и B_M , связываемых с включением, межфазным слоем и бесконечной матрицей в обобщенной задаче Эшелби.

Соберем все потенциалы, определяющие решение уравнения теплопроводности в составной сферической области $B_I \cup B_L \cup B_M$, где $B_I = \{r < r_0\}$ ассоциируется с включением, $B_L = \{r_0 < r < r_1\}$ ассоциируется с промежуточным слоем и $B_M = \{r_1 < r\}$ ассоциируется с матрицей в обобщенной задаче Эшелби:

$$\begin{aligned} \Phi(P) &= A_0 f_n^{(0)}(P), \quad P \in B_I, \\ \Phi(P) &= A_1 f_n^{(0)}(P) + B_1 \hat{\chi}_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad P \in B_L, \\ \Phi(P) &= f_n^{(0)}(P) + B_2 \hat{\chi}_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad P \in B_M. \end{aligned}$$

На основе этих представлений получаем систему четырех уравнений для неизвестных коэффициентов A_0 , A_1 , B_1 , B_2 , отвечающую необходимым контактными условиям на межфазных границах $r = r_1$ и $r = r_2$. Для условий идеального контакта эти уравнения имеют вид:

$$\begin{aligned} A_0 &= A_1 + B_1 \hat{\chi}_n(r_1), \quad A_1 + B_1 \hat{\chi}_n(r_2) = 1 + B_2 \hat{\chi}_n(r_2), \\ \kappa_I A_0 &= \kappa_L A_1 - \frac{n+1}{n} \kappa_L B_1 \hat{\chi}_n(r_1), \\ \kappa_L A_1 - \frac{n+1}{n} \kappa_L B_1 \hat{\chi}_n(r_2) &= \kappa_M - \frac{n+1}{n} \kappa_M B_2 \hat{\chi}_n(r_2). \end{aligned}$$

Первая группа уравнений соответствует условию непрерывности температуры Φ , а вторая группа уравнений соответствует условию непрерывности теплопотока $Q = -\kappa \partial \Phi / \partial n$ на межфазных границах; отсюда получаем все коэффициенты.

Для классического уравнения Ляме, соответствующего представлению (22) необходимо определить для каждой подобласти B_I , B_L и B_M систему четырех базисных гармонических потенциалов на основе векторного гармонического полинома $f_n^{(0)}$:

$$\begin{aligned} f_1(P) &= f_n^{(0)}(P), \quad f_2(P) = \hat{\chi}_n(r) f_n^{(0)}(P), \quad \hat{\chi}_n(r) = r^{-2n-1}, \\ f_3(P) &= \nabla \operatorname{div}(\hat{\chi}_n f_n^{(0)}), \quad f_4(P) = \chi_n(r) \nabla \operatorname{div}(\hat{\chi}_n f_n^{(0)}), \quad \chi_n(r) = r^{2n+5}. \end{aligned}$$

Из линейных комбинаций этих потенциалов составляется решение уравнения Ляме в областях B_I , B_L и B_M , причем с каждой подобластью связывается свой гармонический полином, который в дальнейшем будет выражен через полином $f_n^{(0)}$, соответствующий области B_M и задающий полиномиальную асимптотику на бесконечности:

$$\begin{aligned} f_0(P) &= f_n^{(L)} + C_0 \chi_n \nabla \operatorname{div}(\hat{\chi}_n \hat{f}_n^{(L)}), \quad P \in B_I, \\ f_0(P) &= f_n^{(L)} + A_1 \hat{\chi}_n \hat{f}_n^{(L)} + (B_1 + C_1 \chi_n) \nabla \operatorname{div}(\hat{\chi}_n \hat{f}_n^{(L)}), \quad P \in B_L, \\ f_0(P) &= f_n^{(M)} + A_2 \hat{\chi}_n \hat{f}_n^{(M)} + \\ &+ B_2 \nabla \operatorname{div}(\hat{\chi}_n \hat{f}_n^{(M)}) + C_2 \nabla \operatorname{div}(\hat{\chi}_n \hat{f}_n^{(L)}), \quad P \in B_M. \end{aligned}$$

Таким образом, для сферических включений построено несколько аппроксимирующих систем

функций для уравнений термоупругости при различных условиях контакта на межфазных границах.

В результате решение задачи на ячейке получается методом блоков [9, 10] с помощью квадратичных аппроксимаций, использующих построенные с помощью обобщенной задачи Эшелби решения. Точный аналитический учет контактных условий на межфазных границах, обеспечиваемый специальной конструкцией аппроксимирующих функций, позволяет с высокой степенью точности и с учетом особенностей межфазного взаимодействия воспроизвести на микроуровне физические поля в ячейке, и смоделировать масштабные эффекты, обусловленные взаимодействием межфазного слоя около включений и основной матрицы материала.

Реализация метода Кристенсена-Эшелби оценки эффективных характеристик структурно-неоднородных материалов в Abaqus

Явная конструкция для решения обобщенной задачи Эшелби (с учетом межфазных слоев и разных контактных условий) позволяет реализовать в программном комплексе Abaqus метод Эшелби-Кристенсена [17, 18] (метод четырех сферических тел) оценки эффективных характеристик композитных материалов с дисперсным наполнителем и межфазным слоем.

Этот аналитико-численный метод вычисления эффективных характеристик был реализован в виде пользовательского материала по технологии UMAT, что предполагает реализацию всех алгоритмов вычисления эффективных жесткостных и прочностных характеристик на языке Fortran-90.

Подключение эффективных характеристик осуществляется на уровне модификации входного файла (*.inp) конечно-элементной модели. Описание исходных параметров для вычисления эффективных характеристик (свойства материала включения E_I , ν_I , промежуточного слоя E_L , ν_L , матрицы E_M , ν_M , объемная доля включений c_0 и относительный радиус межфазного слоя $\hat{l}_1 = r_1/r_0$) осуществляется при помощи стандартного ключа *USER MATERIAL и включает 8 дополнительных параметров:

```
MATERIAL, name=U100_material  
*USER MATERIAL, constants=8  
1500, 0.3, 987, 0.3, 135, 0.3, 0.02, 1.
```

Подключение материала осуществляется стандартным образом:

```
*Solid Section, elset=Matrix_strength, material=U100_material
```

Модификация входного файла затрагивает только два места, т.е. требует минимум изменений.

Явное аналитическое решение задачи для функций быстрых переменных и реализация метода Кристенсена-Эшелби в Abaqus позволяют смоделировать масштабные эффекты в металлокомпозитах при малой объемной доле включений наноразмерного масштаба с учетом эффектов локальной модификации матрицы учетом агрегации частиц с ростом их концентрации.

Масштабные эффекты для металлокомпозитов при малой объемной доле нановключений

Для объяснения масштабного эффекта использовалась модель четырех сферических тел, в которой предполагается рост радиуса кластеризованных частиц с ростом концентрации и наличие межфазного слоя постоянной ширины. Модель Фойгхта не может объяснить эффект усиления.

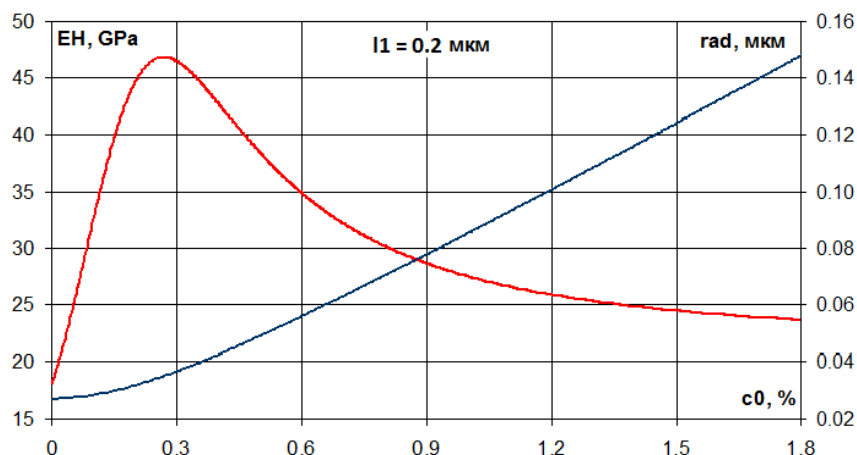


Рис. 5 - Масштабный эффект усиления модуля Юнга в модели структурно-неоднородного материала с межфазным слоем

На рис. 5 представлен эффективный модуль Юнга E_H дисперсного композита, посчитанный для классической модели четырех сферических тел самосогласованным методом Кристенсена-Эшелби при разном объемном содержании включений c_0 , при постоянной ширине межфазного слоя

$l_1 = 0.2 \text{ мкм}$ и при условии агрегации частиц (изменения их радиуса) с ростом концентрации c_0 по закону $r = r_0 \sqrt{1 + 9c_0^2}$, $r_0 = 0.0269 \text{ мкм}$; параметры включения, межфазного слоя и матрицы $E_M = 18 \text{ GPa}$, $\nu_M = 0.33$, $E_I = 380 \text{ GPa}$, $\nu_I = 0.2$, $E_L = 57.5 \text{ GPa}$, $\nu_L = 0.3$. В рассматриваемой модели наблюдается ярко выраженный масштабный эффект усиления модуля Юнга при малой концентрации включений.

На рис. 6 представлено распределение растягивающих напряжений при единичной деформации ячейки с включением при $c_0 = 0.3\%$, посчитанные блочным методом на системе функций, точно учитывающих межфазный слой и контактные условия.

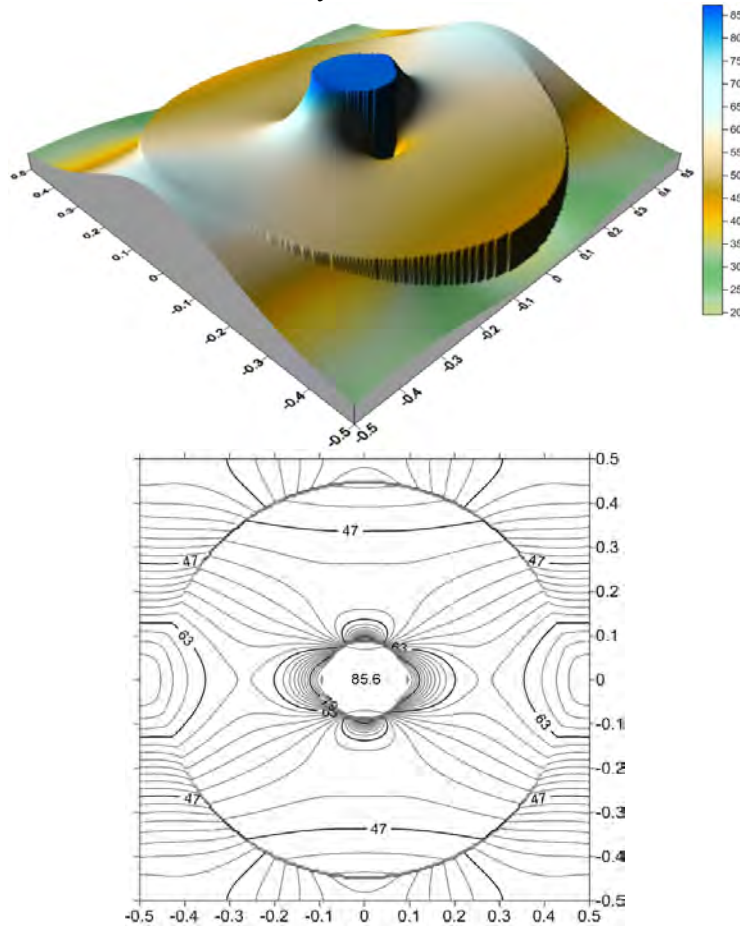


Рис. 6 - Распределение напряжений в ячейке с включением при однородной средней деформации $\langle \varepsilon_3 \rangle = 1$

В алюмокомпозитах наблюдаются эффекты аномального усиления жесткостных характеристик при сверхмалых объемных долях наполнителя. Эти эффекты не могут быть объяснены классическими моделями структурно-неоднородного материала. Так например, классическая оценка сверху, получаемая в предположении равных деформаций всех фаз материала (оценка Фойгхта или правило смеси), дает погрешность 20% по сравнению с экспериментальными данными.

Эффекты усиления при наполнении исходного материала нановключениями объясняются локальной модификацией матрицы взаимодействием дисперсных частиц и матрицы с образованием дополнительного межфазного слоя (с некоторой промежуточной жесткостью) тем большей, чем больше удельная поверхность наночастиц. Следует отметить, что при уменьшении диаметра дисперсных частиц, используемых в качестве наполнителя композитного материала, до субмикронного и наноразмерного уровня их удельная поверхность резко возрастает, достигая значений порядка $30 \div 40 \text{ м}^2/\text{г}$, и поэтому резко возрастает удельная объемная доля межфазного слоя, приводящая к дополнительному скачку свойств при малых концентрациях, наряду с экстремумом при больших и средних концентрациях наполнителя.

С ростом концентрации наночастиц в композитном материале увеличивается их эффективный радиус за счет образования кластеров в результате агрегации наночастиц и изменяется жесткость и относительный размер межфазного слоя. Все эти параметры присутствуют в модели Кристенсена-Эшелби, и могут уточняться по результатам экспериментов.

Для аппроксимации эффективного радиуса частиц r в зависимости от объемной доли включений c нами была принята следующая экспоненциальная зависимость:

$$r = r_{\max} - (r_{\max} - r_0) \exp(-4(c - c_0)), \quad c > c_0, \quad r = r_0, \quad c \leq c_0,$$

где r_0 – эффективный радиус гомогенно распределенных в материале частиц (состояние достигаемое при $c = c_0$), r_{\max} – максимальный эффективный радиус кластеров, образованных в результате агрегации наночастиц. На основе экспериментальных данных было принято $r_0 = 0.015 \text{ мкм}$, $r_{\max} = 0.3 \text{ мкм}$, $c_0 = 0.01\%$.

Важным параметром в рассматриваемой модели является поведение межфазного слоя при изменении концентрации частиц. Мы полагаем, что при начальной концентрации $c = c_0 = 0.01\%$ межфазный слой находится в состоянии предельного насыщения, что соответствует геометрическому касанию сферических слоев промежуточной фазы, математически определяемому формулой $l/r = (0.06c_0/\pi)^{-1/3} - 1 \approx 16.365$. При дальнейшем увеличении объемной концентрации наполнителя размер межфазного слоя падает, не выходя за границу предельного насыщения.

Зависимость физического размера l межфазного слоя от концентрации c была нами аппроксимирована следующей аналитической зависимостью:

$$l = \frac{r}{\sqrt{l_0^{-2} + b(c^2 - c_0^2)}}, \quad l_0 = (0.06c_0/\pi)^{-1/3} - 1, \quad (24)$$

где параметр b определяет близость межфазного слоя к области предельного насыщения и находится на основе экспериментальных данных. Аппроксимация параметра b осуществлялась методом наименьших квадратов по имеющимся экспериментальным данным.

Жесткость межфазной зоны определялась на основе имеющихся данных таким образом, чтобы в экспериментальных точках мы получили совпадение со значением эффективного модуля Юнга, определенного по классической модели четырех сферических тел при некоторой динамике изменения ширины межфазной зоны, определяемой зависимостью (24). Жесткость межфазного слоя может изменяться – уменьшаться или увеличиваться в зависимости от внутренних факторов технологии спекания композита.

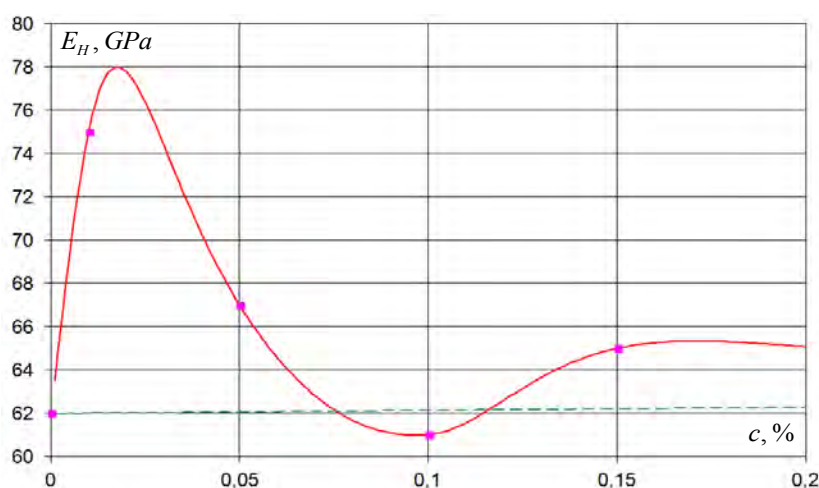


Рис. 7 - Эффективный модуль Юнга в сопоставлении с экспериментальными данными

В итоге получаем следующий результат (см. рис. 7) для эффективного модуля Юнга E_H в сопоставлении с экспериментальными данными (отдельные точки) и классической оценкой Фойгхта (пунктирная линия). Характеристики матрицы и наполнителя: $E_M = 62 \text{ GPa}$, $E_I = 205 \text{ GPa}$, $\nu_M = 0.33$, $\nu_I = 0.31$; для межфазного слоя принята зависимость по формуле (24) при $b = 0.04728$, что соответствует значительному насыщению межфазным слоем (см. рис. 8, область предельного насыщения обозначена пунктирной линией). На рис. 9 дана определенная из экспериментальных данных при сформулированных условиях зависимость жесткости межфазного слоя E_L от объемной концентрации наполнителя.

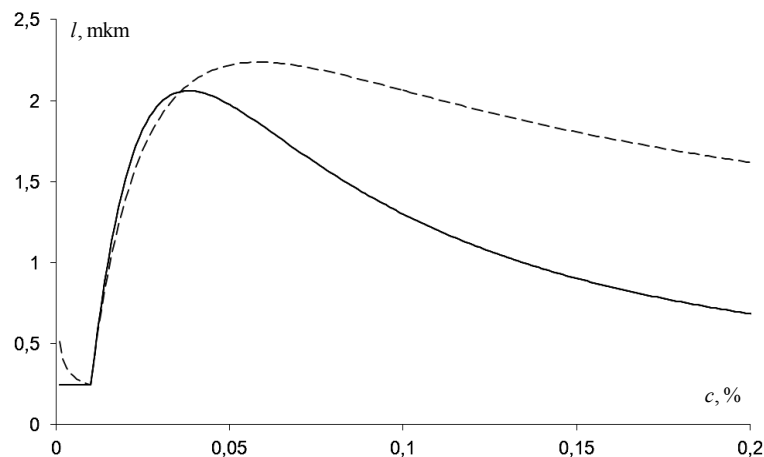


Рис. 8 - Зависимость ширины межфазного слоя от концентрации частиц в модели четырех сферических тел

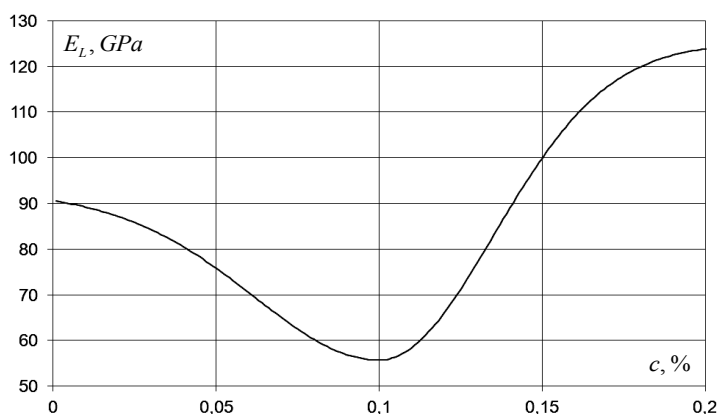


Рис. 9 - Жесткость межфазного слоя в зависимости от объемной концентрации включений

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 01-14-0457 и № 15-01-03649-а.

Заключение

В работе продемонстрирована возможность эффективного моделирования с помощью конечно-элементного комплекса Abaqus эффектов усиления нанокомпозитов на основе матриц разного типа (гиперупругой, металлической и т.д.) с использованием дисперсных включений наноразмерного уровня. В качестве математической основы моделирования использовался параметрический метод асимптотического усреднения уравнений с быстроосциллирующими коэффициентами и специальные системы функций, аналитически учитывающие в микроструктуре композита наличие промежуточного контактного межфазного слоя.

Список литературы

1. Козлов Г.В., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н. Структура и свойства дисперсно-наполненных полимерных композитов. Фрактальный анализ. М.: Альянстрасатом. 2008. 363с.
2. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б., Яновский Ю.Г. Влияние размера включений на механические свойства эластомерных композитов. // Доклады Академии Наук. – 2012. Т. 443, № 4. С. 435-437.
3. Анисимов О.В., Костиков В.И., Штанкин Ю.В., Лобачёва Е.В., Пузик В.И. Разработка металлокомпозитов на основе алюминия, упрочненных наночастицами тугоплавких соединений // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2011, № 3. С. 11-19.
4. Костиков В.И., Агуреев Л.Е., Еремеева Ж.В., Ситников Н.Н., Казаков В.А. Алюмоматричные композиты с малыми добавками наночастиц оксидных материалов // Перспективные материалы. 2014, № 7. С. 13-21.
5. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984. 352 с.
6. Победра Б.Е. Механика композиционных материалов. – М.: Изд-во МГУ. 1984. 336с.
7. Власов А.Н., Мерзляков В.П. Усреднение деформационных и прочностных свойств в механике скальных пород. М.: Изд-во Ассоциации строительных вузов. 2009. 208с.
8. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости // Механика композиционных материалов и

конструкций. 2014. № 4. С. 491-507.

9. *Волков-Богородский Д.Б.* Разработка блочного аналитико-численного метода решения задач механики и акустики // Сборник трудов школы-семинара “Композиционные материалы”. – М.: ИПРИМ РАН, 2000. С. 44-56.

10. *Волков-Богородский Д.Б.* Применение аналитических расчетов на основе метода блоков в связанных задачах механики сплошных сред // Труды Всероссийской научно-практической конференции “Инженерные системы - 2008”, Москва, 7-11 апреля 2008. М.: Изд-во РУДН, 2008. С. 123-138.

11. *Волков-Богородский Д.Б., Харченко С.А.* Параллельная версия аналитико-численного метода блоков для связанных задач волновой виброакустики // Вестник Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского. 2009, № 5. С. 202-209.

12. *Волков-Богородский Д.Б., Сушко Г.Б., Харченко С.А.* Комбинированная MPI+threads параллельная реализация метода блоков для моделирования тепловых процессов в структурно-неоднородных средах // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т.11. С. 127-136.

13. *Козлов Г.В., Яновский Ю.Г., Карнет Ю.Н.* // Механика композиционных материалов и конструкций. 2011. Т. 17. № 3. С. 351-361.

14. *Волков-Богородский Д.Б., Лурье С.А.* Метод радиальных множителей для точного решения обобщенной проблемы Эшелби в градиентной теории упругости для многослойных цилиндрических и сферических включений. // Сборник трудов 2-ой всероссийской научной конференции «Механика наноструктурированных материалов и систем» (г. Москва, 17-19 декабря 2013 г.). Т. 1. М.: ИПРИМ РАН, 2013. С. 42-56.

15. *Volkov-Bogorodsky D.B., Ryzhov S.A.* Modeling of Composite Materials in SIMULIA Abaqus with the Help of Analytical Solutions of Generalized Eshelby Problem //2013 SIMULIA Community Conference, May 22-24, Vienna, Austria, www.3ds.com/SCC2013.

16. *Волков-Богородский Д.Б.* Аналитико-численный метод оценки эффективных характеристик структурно-неоднородных материалов // Труды X Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики. Вестник Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского. 2011. № 4. Часть 2. Н. Новгород: Изд-во ННГУ. С. 407-409.

17. *Кристенсен Р.* Введение в механику композитов. М.: Мир, 1982. 334с.

18. *Christensen R.M., Lo K.H.* Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models // J. Mech. Phys. Solids. 1979. V. 27. P. 315-330.