

А.Ю. Смолин, И.С. Коноваленко, С.Г. Псахье

Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов*

A.Yu. Smolin, I.S. Konovalenko, S.G. Psakhie

Multilevel Modeling the Deformation and Fracture of Brittle Porous Materials Based on Movable Cellular Automaton Method

Разработана двухуровневая модель механического поведения пористой керамики. На первом уровне явно учитывались малые поры, определялся представительный объем и эффективная функция отклика. На втором – явно учитывались крупные поры, матрица имела характеристики, определенные на первом уровне модели.

Ключевые слова: пористая керамика, деформация и разрушение, многоуровневое моделирование.

Two-level model of mechanical behavior of porous ceramics was developed. At first level small pores were taken into account directly, the representative volume and effective response function were determined. At second level big pores were taken into account and the matrix was described by characteristics taken from the first level.

Key words: porous ceramics, deformation and fracture, multi-level modeling.

Широко применяемые в настоящее время керамические материалы имеют достаточно сложную пористую структуру [1]. В зависимости от технологии изготовления в них могут присутствовать поры нескольких масштабных уровней в различных соотношениях и вариантах их пространственного распределения. При численном исследовании отклика таких материалов в рамках одноуровневого подхода явный учет особенностей их структуры и поведения на каждом из масштабных уровней невозможен. В связи с этим цель работы – развитие многоуровневого подхода и разработка иерархической модели для описания деформации и разрушения наноструктурных пористых керамических материалов при простом сдвиге и одноосном сжатии на основе метода подвижных клеточных автоматов [2]. Выбор этого метода обусловлен тем, что он успешно рекомендовал себя при исследовании механического поведения хрупких пористых сред от момента зарождения первых повреждений вплоть до разрушения [3–6]. Расчеты проводились для модельного материала со свойствами спеченной керамики ZrO_2 со средним размером пор, превышающим размер зерна, и двумя максимумами на гистограмме распределения пор по размерам.

Построение иерархической модели материала со свойствами рассматриваемой керамики проводилось в несколько этапов. На первом этапе осуществлялось определение представительного объема и соответствующих ему эффективных функций от-

клика автоматов макромасштабного уровня. На «микромасштабном» уровне (уровень, на котором учет поровой структуры образцов с размерами 20÷250 мкм осуществлялся явным образом) представительный объем определялся на основе анализа сходимости упругих и прочностных характеристик модельных пористых образцов по мере увеличения их размеров. Моделировалось механическое поведение шести групп пористых керамических образцов в условиях простого сдвига и одноосного сжатия. Внутри групп образцы характеризовались одинаковыми размерами, но различным пространственным расположением пор. Каждая группа содержала шесть образцов. Рассматривались квадратные образцы со сторонами 20, 60, 100, 150, 200 и 250 мкм соответственно своей группе. Размер пор материала составлял 3 мкм, клеточного автомата – 1 мкм. Поровая структура образцов задавалась явно – удалением в случайном порядке автоматов из начальной плотной упаковки. Пористость образцов этого уровня – 7%. Задачи решались в условиях плоской деформации. Функция отклика автоматов соответствовала диаграмме нагружения моделируемой керамики с пористостью 2%.

Анализ сходимости механических свойств образцов с увеличением их размеров проводился на основе оценки отклонения эффективного упругого модуля образца E_{eff} и его прочности σ_c от соответствующих средних по группе $\langle E_{\text{eff}} \rangle$, $\langle \sigma_c \rangle$ (для сдвига G_{eff} и τ_c от $\langle G_{\text{eff}} \rangle$ и $\langle \tau_c \rangle$). Расчеты показали нели-

* Работа выполнена по гранту МК-5260.2010.8 Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН №113.

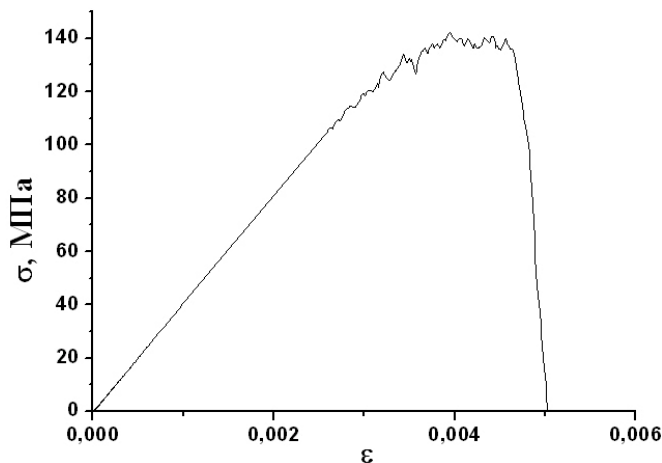
нейную сходимость прочностных и упругих характеристик образцов. Величины относительного отклонения E_{eff} , σ_c , G_{eff} и τ_c для образцов со сторонами 150 мкм от соответствующих средних по группе составляют 0,51, 6% и 0,38, 7,6%. Таким образом, пористые образцы со сторонами 150 мкм являются представительными на данном масштабном уровне. Значения $\langle E_{\text{eff}} \rangle$ и $\langle \sigma_c \rangle$ приняты в качестве параметров функции отклика автоматов на макромасштабном уровне.

Второй этап заключался в проведении расчетов на макроуровне с явным учетом поровой структуры материала. Моделировались девять квадратных пористых образцов со стороной 22,5 мм. Диаметр автомата – 150 мкм. Перенос информации о структуре и механических свойствах материала с микро- на макромасштабный уровень осуществлялся путем использования для автоматов макроуровня функций отклика с параметрами диаграмм нагружения представительных объемов материала на микроуровне. Функция отклика автоматов макроуровня имела линейный вид, а ее параметры (максимальное значение удельной силы сопротивления нагружению и упругий параметр, соответствующий модулю Юнга) составляли 846 МПа и 112 ГПа. Учет поровой структуры образцов на макроуровне осуществлялся явным образом, так же как и на первом (микромасштабном) уровне. В соответствии с гистограммами распределения пор по размерам пористость образ-

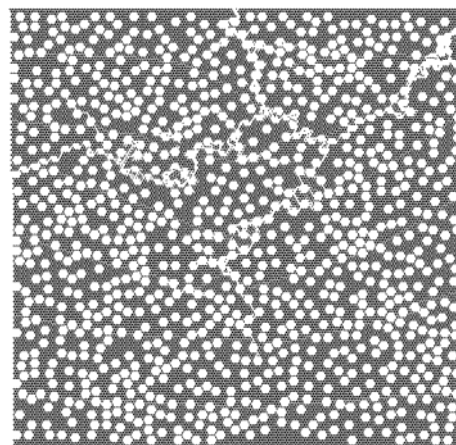
цов – 28%, размер пор – 450 мкм. Схема приложения механической нагрузки и предположение о виде напряженного состояния аналогичны используемым в задаче об определении представительного объема на «микроуровне».

На третьем этапе проводилась проверка адекватности модели. Критериями адекватности модели рассматриваемой керамике выступали: 1) линейный вид диаграммы нагружения модельных образцов с наличием горизонтального плато, соответствующего квазивязкому поведению хрупких материалов с пористостью выше 20%; 2) качественное взаимное соответствие картин разрушения модельных образцов и реальной керамики; 3) попадание прочностных характеристик образцов в определенный интервал, найденный на основе обработки результатов натурального эксперимента.

Сравнение расчетных диаграмм модельных образцов с соответствующими диаграммами нагружения хрупких пористых тел показало их хорошее качественное соответствие (рис. а). В частности, на расчетных диаграммах также присутствует горизонтальное плато с множественными «колебаниями» напряжения, характерное для квазивязкого разрушения материала [4–6] с величиной пористости более 20%. Таким образом, первый критерий адекватности модели на макромасштабном уровне выполняется.



а)



б)

Диаграмма нагружения (а) и картина разрушения (б) образца с пористостью 28% в момент образования в нем системы макротрещин при одноосном сжатии

Расчеты показали, что образцы разрушаются в результате развития в них несимметричной системы макротрещин (рис. б), имеющих достаточно сложный путь распространения. Кроме того, в образцах также имеет место генерация множественных отдельных повреждений вблизи трещин. В случае квазивязкого разрушения генерация повреждений и рост трещин происходят локально, сразу в нескольких местах образца. До определенного момента отдельные трещины не сливаются в маги-

стральную – стадия ее роста как бы «растягивается». Это приводит к обширным локальным растрескиваниям материала без потери целостности образца и, как следствие, к существенной диссипации упругой энергии и снижению эффективных упругих свойств материала. Таким образом, выполняется второй критерий адекватности построенной модели.

Для проверки выполнения третьего критерия адекватности модели были найдены средние по группе модельных образцов эффективные значения их упру-

гого модуля $\langle E_{\text{eff}} \rangle$ и максимальной удельной силы сопротивления нагружению $\langle \sigma_{c, \text{eff}} \rangle$. Они сравнивались с соответствующими величинами, найденными из натуральных экспериментов. Было показано, что отклонение $\langle \sigma_{c, \text{eff}} \rangle$ и $\langle E_{\text{eff}} \rangle$ модельных образцов от экспериментальных данных не превосходит 30 и 12%, соответственно, что является достаточно хорошей точностью при моделировании высокопористых сред в плоском приближении, т.е. выполняется третий критерий адекватности модели.

Таким образом, развитый в настоящей работе на основе метода подвижных клеточных автоматов многоуровневый подход и разработанная соответствующая иерархическая модель позволяют адекватно описывать деформацию и разрушение пористых сред при механическом нагружении. Предложенный подход общий, и при необходимости на его основе можно моделировать гетерогенные среды, содержащие любое число масштабных структурных уровней.

Библиографический список

1. Global Roadmap for Ceramics: Proceedings of 2nd International congress on ceramics (ICC2). Edited by Alida Belosi and Gian Nicola Babini. – Verona (Italy), 2008. – June 29 – July 4.
2. Псахье С.Г. Остермайер Г.-П., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Коростелев С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физ. мезомеханика. – 2000. – Т. 3, №2.
3. Коноваленко Иг.С., Смолин А.Ю., Псахье С.Г. Особенности деформации и разрушения хрупких пористых сред с различной морфологией пор // Известия вузов. Физика. – 2005. – Т. 48, №6.
4. Смолин А.Ю., Коноваленко Иг.С., Кульков С.Н., Псахье С.Г. О возможности квазивязкого разрушения хрупких сред со стохастическим распределением пор // ПЖТФ. – 2006. – Т. 32, №17.
5. Смолин А.Ю., Коноваленко Иг.С., Кульков С.Н., Псахье С.Г. Моделирование разрушения хрупких пористых сред с различной внутренней структурой // Известия вузов. Физика. – 2006. – Т. 49, №3.
6. Коноваленко И.С. Теоретическое исследование деформации и разрушения пористых материалов медицинского назначения и биомеханических конструкций: дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Томск, 2007.