

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

Иг.С. Коноваленко
e-mail: igkon@ispms.tsc.ru

А.Ю. Смолин
А.Ю. Никонов
С.Г. Псахье

*Учреждение Российской академии наук
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН*

Предложен подход к многоуровневому описанию деформации и разрушения хрупких пористых сред с двумя максимумами на гистограмме распределения пор по размерам в рамках метода подвижных клеточных автоматов. Подход основан на определении эффективной функции отклика клеточного автомата прямым моделированием представительного объема пористой среды. Разработана двухуровневая иерархическая модель механического поведения керамики на основе ZrO_2 с размером пор, превышающим средний размер зерна при сдвиговом нагружении и одноосном сжатии. Тестовые расчеты показали, что построенная многоуровневая модель позволяет корректно качественно и количественно описывать деформацию и разрушение хрупких сред с иерархической поровой структурой.

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. Например, стенки макропор (ячеек) могут включать поры меньшего размера [2]. Экспериментальные исследования зачастую дают информацию об испытываемом материале только на макроуровне, в то время как крайне важным является достоверное знание о свойствах материала и на иных структурных уровнях, в частности для оценки их вклада в процессы деформации и разрушения. Перспективным для решения обозначенных вопросов, является численное моделирование. Однако, в рамках одноуровневого подхода явный учет особенностей структуры и поведения материала на каждом из масштабных уровней представляется невозможным. Это связано как со значительными вычислительными затратами при явном задании поровой структуры материала в модели, так и с иерархическим строением порового пространства керамики [2]. Последнее обстоятельство само по себе предполагает использование многоуровневого подхода при описании подобных систем. В связи с этим, целью работы является развитие многоуровневого подхода, предложенного в работе [3], и разработка соответствующей иерархической модели для описания деформации и разрушения наноструктурных пористых керамик при механическом нагружении на

*Работа выполнена при поддержке гранта МК-5260.2010.8 Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук.

основе метода подвижных клеточных автоматов (МСА) [4]. Выбор этого метода обусловлен тем, что он успешно зарекомендовал себя при исследовании механического поведения хрупких пористых сред от момента зарождения первых повреждений вплоть до разрушения [5]. 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 [2].

Построение иерархической модели материала со свойствами рассматриваемой керамики проводилось в несколько этапов.

1. Определение представительного объема и соответствующих ему эффективных функций отклика автоматов на макроскопическом масштабном уровне

На «микромасштабном» уровне предлагаемой модели представительный объем определялся на основе анализа сходимости упругих и прочностных характеристик модельных пористых образцов по мере увеличения их размеров. Для решения этой задачи в работе моделировалось механическое поведение шести групп плоских пористых керамических образцов в условиях как сдвигового нагружения, так и одноосного сжатия. Внутри каждой группы образцы характеризовались одинаковыми размерами, но различным пространственным расположением пор. Каждая группа содержала шесть образцов. Рассматривались квадратные образцы, у которых сторона h составляла 20, 60, 100, 150, 200 и 250 мкм соответственно своей группе. Принято допущение, что все поры рассматриваемой керамики, и, соответственно, модельного материала одинаковы и имеют форму сферы. Их размер, в соответствии с максимумом на гистограмме распределения реальной керамики, составлял 3 мкм [2]. Размер клеточного автомата выбран в соответствии со средним размером зерна, и составлял 1 мкм. Поровая структура образцов задавалась путем удаления в случайном порядке одиночных автоматов, а также шести их ближайших соседей. Величина пористости образцов составляла 7% [2].

В случае сдвигового нагружения механическая нагрузка прикладывалась путем задания одинаковой скорости в горизонтальном направлении верхнему слою автоматов при жестком закреплении автоматов нижнего слоя образца. На начальном этапе скорость движения автоматов верхнего слоя нарастала по синусоидальному закону (аргумент функции изменялся от $-\pi/2$ до $\pi/2$) от 0 до 1 м/с, а затем оставалась постоянной. Такая схема использовалась для устранения искусственных динамических эффектов и обеспечения плавного и быстрого выхода процесса деформирования образца на квазистационарный режим. По горизонтальной оси использовались периодические граничные условия. При одноосном сжатии скорость автоматов верхнего слоя в вертикальном направлении нарастала также, как и при сдвиге (до 1 м/с), а нижнего — была задана равной нулю, боковые поверхности образца были свободны. Задачи решались в условиях плоской деформации. Функция отклика автоматов имела линейный вид и соответствовала диаграмме нагружения моделируемой керамики с пористостью 2% [2]. Модуль сдвига для клеточного автомата G составлял 59.2 ГПа, коэффициент Пуассона ν — 0.3. В качестве критерия разрыва межавтоматных связей использовался критерий разрушения по интенсивности касательных напряжений.

Для пористой керамики поиск представительного объема осуществлялся по группам пористых образцов, чьи размеры равны или превосходят размеры представительного

объема для сплошной среды (внутри группы все образцы были одинакового размера, но с различным пространственным расположением пор). Анализировалась величина отклонения эффективного упругого модуля модельного образца E_{eff} и его прочности σ_c (определяемых по расчетной диаграмме нагружения) от соответствующих средних по группе величин $\langle E_{eff} \rangle$, $\langle \sigma_c \rangle$. Результатом второго этапа являлся размер образца (представительного объема), начиная с которого отклонение E_{eff} и σ_c от $\langle E_{eff} \rangle$ и $\langle \sigma_c \rangle$ не превосходит приемлемой для решения поставленной задачи величины. В данной работе использовались величины 3% для E_{eff} и 15% для σ_c , что является приемлемым для рассматриваемых гетерогенных сред.

Результаты расчетов показали, что для сплошной модельной среды, представительными на данном масштабном уровне являются монолитные образцы со стороной $h \geq 60$ мкм. Для пористого модельного материала результаты расчетов, для случая одноосного сжатия представлены на рисунке 1. Они отражают относительное изменение эффективных упругих и прочностных свойств образцов (модуля сжатия E_{eff} и прочности на сжатие σ_c) в зависимости от их размеров. Для этих характеристик получена нелинейная сходимости в рассматриваемом диапазоне изменения размеров образцов. У образцов со стороной $h = 150$ мкм величины относительного отклонения E_{eff} , G_{eff} , σ_c и τ_c от соответствующих средних по группе величин ($\langle E_{eff} \rangle$, $\langle G_{eff} \rangle$, $\langle \sigma_c \rangle$, $\langle \tau_c \rangle$) составляют 0.51, 0.38, 6 и 7.6%, что не превосходит требуемого предела (3% и 15%) и достаточно для решения поставленной задачи.

Таким образом, показано, что пористые образцы со стороной $h = 150$ мкм и более являются представительными объемами рассматриваемой модельной среды на «микромасштабном» уровне. На основе результатов проведенных расчетов стало возможным продолжение исследований на более высоком, макромасштабном уровне, при этом средние по группе значения $\langle E_{eff} \rangle$ и $\langle \sigma_c \rangle$ были приняты в качестве параметров функции отклика автоматов на этом масштабном уровне. Переход от упругого модуля, определяемого по рассчитанной диаграмме нагружения в условиях плоской деформации $E_{ПДС}$, к модулю Юнга осуществлялся на основе соотношения $E = E_{ПДС}(1 - \nu^2)$ [6].

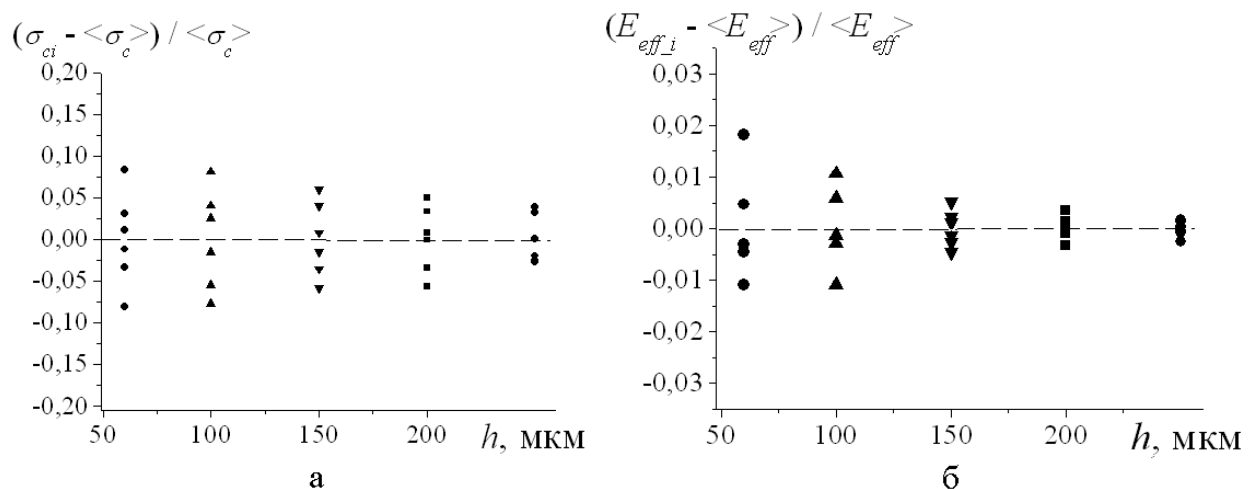


Рис. 1. Модельные зависимости: (а) – отклонение прочности на сжатие σ_c и (б) – упругого модуля E_{eff} пористых модельных образцов от соответствующих средних по группе величин $\langle \sigma_c \rangle$ и $\langle E_{eff} \rangle$ при одноосном сжатии

2. Проведение расчетов на макроуровне с явным учетом поровой структуры

На макроуровне в качестве объектов моделирования использовались девять пористых плоских квадратных образцов со стороной $h = 22.5$ мм. Диаметр автомата, в соответствии с размером определенного представительного объема, составлял 150 мкм. Перенос информации о поровой структуре и определяемых ею эффективных прочностных и упругих свойствах материала с микромасштабного на макромасштабный уровень осуществлялся посредством использования для автоматов макроуровня функций отклика, определенных на основе расчетов для 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 осуществлялся явным образом, так же как и на первом (микромасштабном) уровне. В соответствии с гистограммами распределения пор по размерам пористость образцов составляла 28%, размер пор – 450 мкм [2]. Схема приложения механической нагрузки и предположение о виде напряженного состояния аналогичны используемым в задаче об определении представительного объема. Структура образца со стороной $h = 15$ мм представлена на рисунке 2,а.

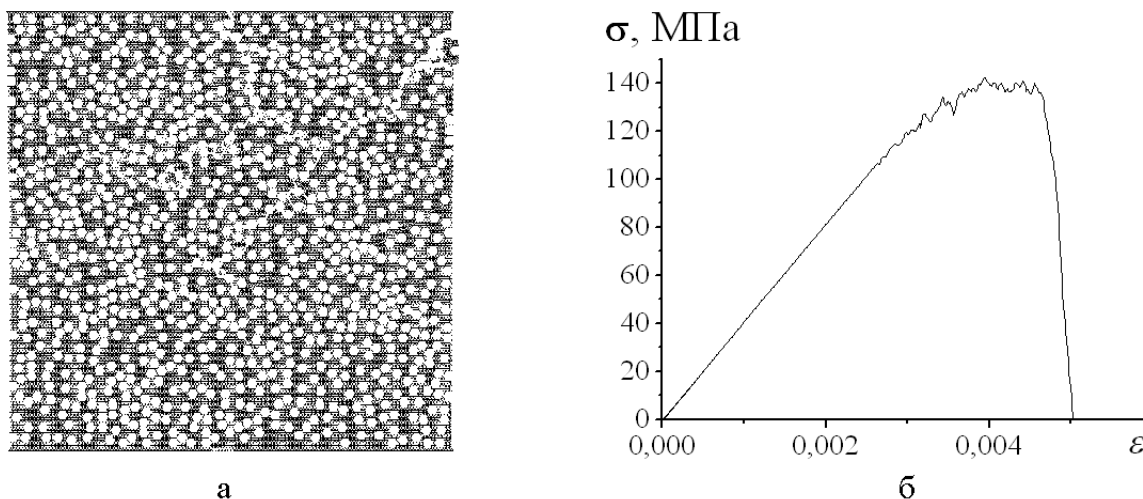


Рис. 2. Картина разрушения образца с пористостью 28% в момент образования в нем системы макротрещин при одноосном сжатии (а) и его диаграмма нагружения (б)

3. Проверка адекватности (верификация) модели

Обязательным шагом в построении любой модели механического поведения реального материала является проверка ее адекватности. Модель будем считать адекватной рассматриваемой пористой керамике, если результаты модельных расчетов удовлетворяют следующим критериям:

1. Линейный вид диаграммы нагружения модельных образцов с наличием горизонтального плато, соответствующего квазивязкому поведению пористых хрупких материалов с пористостью выше 20%;

2. Качественное взаимное соответствие картин разрушения модельных образцов и реальной керамики;
3. Попадание прочностных характеристик модельных образцов в определенный интервал, найденный на основе обработки результатов натурального эксперимента.

Типичная для модельных образцов диаграмма нагружения при одноосном сжатии представлена на рис. 2,б. На диаграммах можно выделить несколько характерных участков. Первый, линейный участок, соответствующий упругому деформированию образца (характерен для хрупких материалов при любом значении пористости). Далее незначительный по протяженности, восходящий участок со срывами кривой и почти горизонтальное плато, со множественными «колебаниями» напряжения. Этим участкам соответствуют повторяющиеся процессы генерации повреждений по всему образцу, локального растрескивания и затем – упругого деформирования материала и т.д. Последний участок диаграммы – ниспадающий, соответствующий развитию макротрещины или системы макротрещин, а также генерации отдельных множественных повреждений.

Заметим, что горизонтальное плато на диаграмме сжатия хрупких образцов (рис. 2,б) говорит об их квазивязком разрушении, которое реализуется только при величинах пористости образца более 20% [5]. Степень проявления этих свойств пропорциональна протяженности данного участка (плато) и различна для каждого из модельных образцов. Уменьшение длины данного участка диаграммы – говорит о приближении разрушения к хрупкому типу. Стоит заметить, что в данном случае квазивязкий характер разрушения полностью обусловлен структурным фактором, поскольку в модели не учитываются ни фазовые переходы, ни перестройки решетки материала.

Сравнение рассматриваемых диаграмм с соответствующими диаграммами хрупких пористых тел в условиях сдвига и одноосного сжатия [2, 5, 7] показало их хорошее качественное соответствие. Таким образом, первый критерий адекватности модели на макроскопическом уровне, касающийся общего вида диаграммы нагружения материала, выполняется.

Типичная для модельных образцов картина разрушения, отображаемые в виде сеток межэлементных связей, в момент образования в образцах макротрещин представлена на рис. 2,а. Образцы разрушаются в результате развития в них несимметричной системы макротрещин, имеющих достаточно сложный путь распространения. Кроме того, в образцах также имеет место генерация множественных отдельных повреждений вблизи трещин. В случае квазивязкого разрушения образца (рис. 2,а) генерация повреждений и рост трещин происходят локально, сразу в нескольких местах образца, характеризующихся наибольшими величинами локальной пористости (и наименьшей толщиной перемычек). До определенного момента отдельные трещины не сливаются в магистральную – 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 (всего образца). 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 упругого модуля ($\langle E_{eff} \rangle$) и максимальной удельной силы сопротивления нагружению ($\langle \sigma_{eff} \rangle$) при

одноосном сжатии и простом сдвиге. Далее они сравнивались с соответствующими величинами, найденными из натуральных экспериментов. Было показано, что отклонение $\langle \sigma_{eff} \rangle$ и $\langle E_{eff} \rangle$ модельных образцов от экспериментальных данных не превосходит 30% и 12%, соответственно, что является достаточно хорошей точностью при моделировании высокопористых сред в плоском приближении. Это говорит о хорошем количественном соответствии расчетов и эксперимента и о выполнении третьего критерия адекватности модели.

Таким образом, в данной работе на основе многоуровневого подхода к моделированию построена двухуровневая модель пористой керамики с бимодальной функцией распределения пор по размерам.

Заключение

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. Поскольку предложенный подход является достаточно общим, то при необходимости, на его основе можно моделировать гетерогенные среды содержащие и более двух масштабных структурных уровней.

Работа выполнена при поддержке гранта МК-5260.2010.8 Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук

Список литературы

- [1] Global Roadmap for Ceramics: Proceedings of 2nd International congress on ceramics (ICC2). Edited by Alida Belosi and Gian Nicola Babini. Institute of Science and Technology for Ceramics, National Research Council, Verona (Italy), 2008. 833 p.
- [2] БУЯКОВА С.П. Свойства, структура, фазовый состав и закономерности формирования пористых наносистем на основе ZrO₂: дис. ... докт. техн. наук. Томск, 2008. 309 с.
- [3] Иг.С. Коноваленко, А.Ю. Смолин, С.Г. Псахье. Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12, № 5. С. 29–36.
- [4] ПСАХЬЕ С.Г. ОСТЕРМАЙЕР Г.П., ДМИТРИЕВ А.И. и др. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физ. мезомеханика. 2000. Т.3, №2. С. 5–13.
- [5] КОНОВАЛЕНКО Иг.С. Теоретическое исследование деформации и разрушения пористых материалов медицинского назначения и биомеханических конструкций: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Томск, 2007. 174 с.
- [6] СЕДОВ Л.И. Механика сплошной среды. Т. 2. Москва: Наука, 1970. 568 с.
- [7] ГОГОЦИ Г.А. К вопросу о классификации малодеформируемых материалов по особенностям их поведения при нагружении // Проблемы прочности. 1977. N 1. С. 77–82.