

УДК 532.5; 519.6

**Иг.С. Коноваленко, А.Ю. Смолин, Ив.С. Коноваленко,
В.В. Промахов, С.Г. Псахье**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ
МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ХРУПКОГО МАТЕРИАЛА
ОТ ПАРЦИАЛЬНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ ПОР РАЗНОГО РАЗМЕРА
В ЕГО СТРУКТУРЕ¹**

В рамках метода подвижных клеточных автоматов построена 2D-модель хрупкого пористого материала с бимодальным распределением пор по размерам. На основе численных расчетов построена аналитическая оценка для зависимости прочностных и упругих свойств материала при сжатии от его общей пористости и парциальных пористостей, соответствующих порам разного размера.

Ключевые слова: численное моделирование, метод подвижных клеточных автоматов, прочностные и упругие свойства, керамика.

В настоящее время в технике и машиностроении широко используется класс хрупких пористых материалов. Одним из представителей данного класса является спеченная керамика на основе нанокристаллических оксидов металлов (в частности, алюминия и циркония). В силу большого разнообразия технологических режимов синтеза керамики в ее структуре присутствуют поры различных размеров. Функция распределения пор по размерам этого материала содержит, как правило, несколько максимумов. При этом число пор, соответствующих каждому максимуму функции распределения, может быть различным для каждого из значений общей пористости, а сама она – изменяться в широких пределах. В этом аспекте керамика представляет собой уже не просто пористое тело, а некоторую конструкцию, механическое поведение и свойства которой определяются указанными параметрами структуры. На практике именно сочетание параметров поровой структуры и механических свойств материала в значительной степени определяют область его функционального применения. В связи с этим представляется актуальным и необходимым знание о зависимости свойств керамики от указанных параметров поровой структуры во всем интервале изменения их значений. В данной работе проведено теоретическое исследование, целью которого являлось выявление принципиальной возможности определения вида функциональной зависимости прочностных и упругих свойств керамики, от ее общей пористости и от доли в ней пор, приходящихся на один из максимумов функции распределения пор по размерам. Расчеты проводились на основе многоуровневого подхода, развиваемого в рамках метода подвижных клеточных автоматов [1, 2].

Оценка механических свойств керамики проводилась на основе моделирования теста на одноосное сжатие. Анализ получаемой при этом диаграммы нагружения позволяет получить необходимые эффективные характеристики, в частно-

¹ Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-08-00379-а).

сти, прочность на сжатие и упругий модуль сжатия. Следует также отметить, что напряженное состояние, реализующееся в пористых образцах при этом виде нагружения, в той или иной степени имеет место в локальных объемах пористого материала при сложном нагружении.

Моделировались три группы плоских образцов с общей пористостью C_b , равной 0,075, 0,15 и 0,223 (в объемных долях) [3, 4]. Рассматривались квадратные образцы, у которых сторона h составляла 60 мкм. Каждая группа содержала несколько подгрупп. Образцы каждой подгруппы характеризовались своими уникальными (в пределах группы) значениями количества пор первого и второго максимумов функции распределения пор по размерам и соответствующими им величинами пористостей C_1 и C_2 . При этом для всех образцов каждой подгруппы (внутри одной группы) выполнялось равенство $C_1 + C_2 = C_b$, т.е. $0 \leq C_1 \leq C_1$ и $0 \leq C_2 \leq C_1$. Каждая подгруппа содержала 8 образцов с различным пространственным расположением пор.

Задача решалась в условиях плоской деформации. Принято допущение, что все поры рассматриваемой керамики и соответственно модельного материала равноосные и их размер в соответствии с двумя максимумами на гистограмме распределения пор по размерам составляет либо 1,2, либо 3,6 мкм [3, 4]. Размер клеточного автомата выбран в соответствии со средним размером зерна и составлял 1,2 мкм [3, 4]. Поровая структура образцов задавалась путем удаления в случайном порядке одиночных автоматов (в случае пор первого максимума), а также шести их ближайших соседей (в случае пор второго максимума) из их плотной гексагональной упаковки. Начальная структура модельных образцов каждой группы с различными значениями C_1 и C_2 представлена на рис. 1.

Механическая нагрузка прикладывалась путем задания одинаковой скорости в вертикальном направлении к верхнему слою автоматов, при этом вертикальная скорость нижнего слоя образца была задана равной нулю. Автоматам верхнего и нижнего слоев образца были также разрешены горизонтальные смещения, а боковые поверхности образца были свободны. На начальном этапе скорость движения автоматов верхнего слоя нарастала по синусоидальному закону 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.

Функция отклика подвижных клеточных автоматов имела линейный вид и соответствовала диаграмме нагружения нанокристаллической керамики на основе диоксида циркония с пористостью 0,02 [3, 4]. Модуль сдвига для клеточного автомата G составлял 59,2 ГПа, коэффициент Пуассона $\nu - 0,3$. В качестве критерия разрыва межавтоматных связей использовался критерий разрушения по интенсивности касательных напряжений.

Прочность модельного керамического образца σ_c соответствовала максимальному значению его удельной силы сопротивления нагружению. Упругие свойства керамики определялись эффективным модулем сжатия модельных образцов E (по углу наклона линейного участка диаграммы нагружения). Прочностные и упругие характеристики образцов (σ_c и E) для каждой комбинации значений C_1 , C_2 и C_b определялись на основе анализа диаграмм сжатия серии из 8 модельных образцов (внутри каждой подгруппы), типичный вид которых представлен на рис. 2.

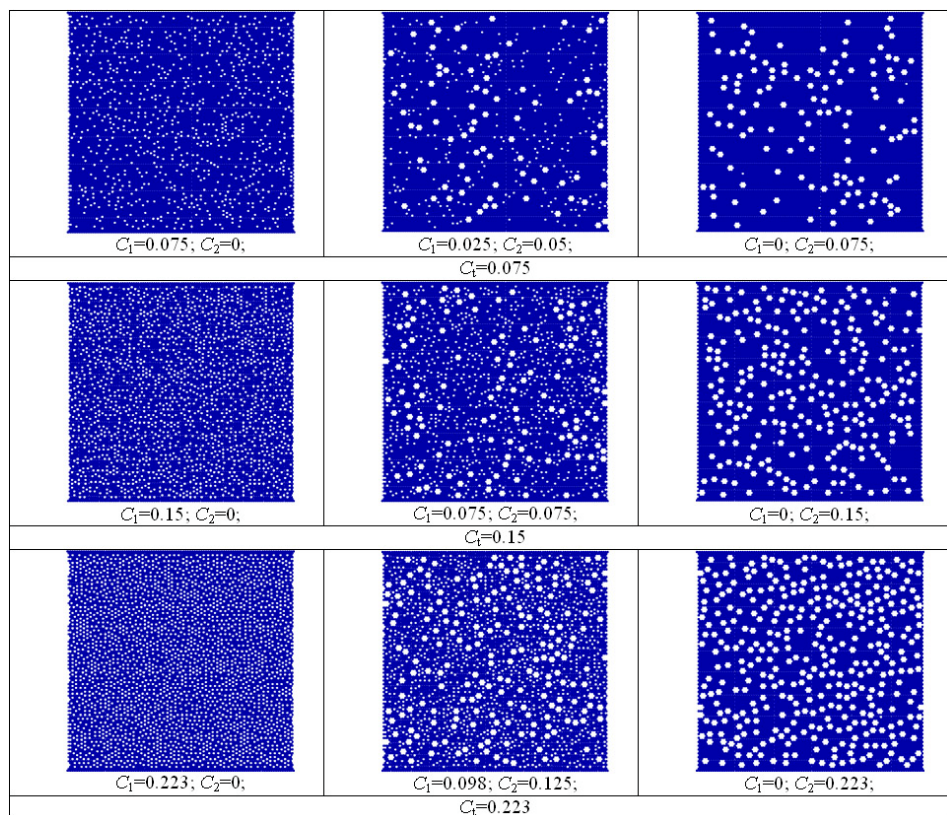


Рис. 1. Начальная структура модельных образцов с различными значениями параметров поровой структуры ($C_1; C_2$)

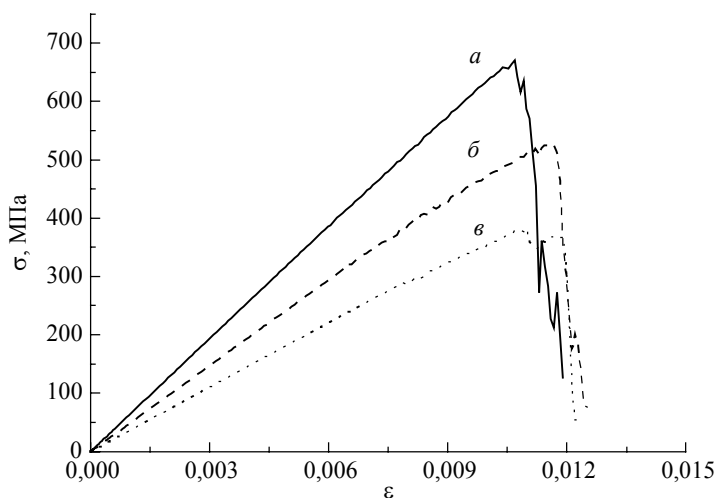


Рис. 2. Диаграммы нагружения (сжатия) модельных образцов с разными значениями параметров поровой структуры ($C_1; C_2$): $a - (0,075; 0,025; 0,05)$ $b - (0,15; 0,075; 0,075)$ $v - (0,223; 0,098; 0,125)$

Методика их поиска заключалась в следующем. Для каждого из десяти модельных образцов каждой подгруппы находились его эффективный модуль сжатия E_i и прочность на сжатие σ_{c_i} . Величины σ_c и E для каждого из параметров поровой структуры материала определялись как среднее арифметическое значений σ_{c_i} и E_i внутри каждой подгруппы.

Результаты моделирования показали, что прочностные свойства модельных образцов определяются как величиной общей пористости C_b , так и долей пористости, соответствующей одному из максимумов функции распределения пор по размерам, например C_2/C_1 . Что касается упругих свойств, то они определяются только величиной общей пористости C_b , что согласуется с результатами натурных экспериментов [3, 4]. Зависимости, отражающие эти тенденции для модельных образцов, представлены на рис. 3 и 4. Расчеты проведены для случая минимального, максимального и промежуточного значения общей пористости C_1 .

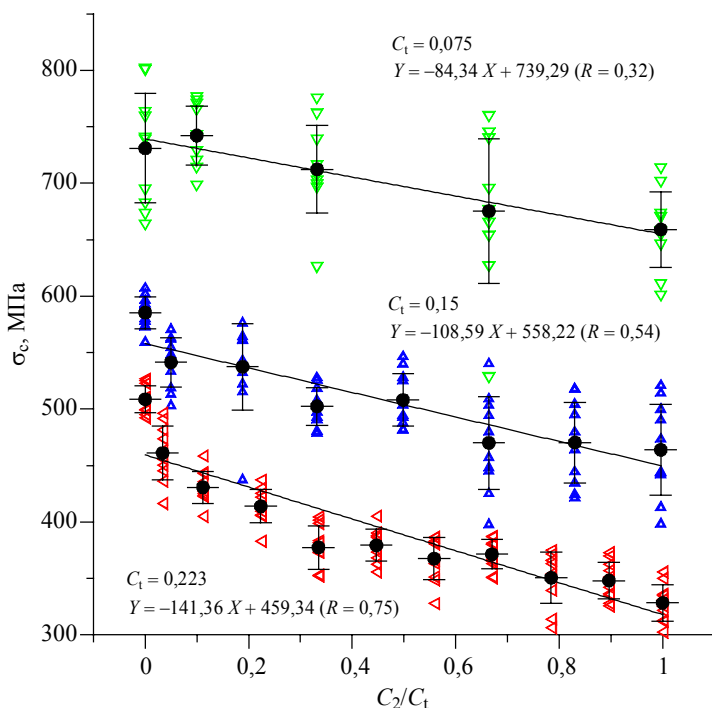


Рис. 3. Зависимости прочности модельных пористых образцов σ_c от параметра C_2/C_1 , характеризующего долю пористости второго максимума C_2 в общей пористости C_1 при значениях C_1 : $C_{1_1} = 0,075$, $C_{1_2} = 0,15$, $C_{1_3} = 0,223$

Из рис. 3 и 4 можно видеть, что результаты моделирования хорошо аппроксимируются линейными функциями вида

$$Y = -KX + B. \quad (1)$$

Здесь K и B есть параметры, приобретающие каждый свое значение в зависимости от величины C_1 , т.е. $K = K(C_1)$ и $B = B(C_1)$, а $X = C_2/C_1$, $0 \leq X \leq 1$. При этом

для упругих свойств (рис. 4), в силу малости слагаемого $-KX$ и погрешности численных расчетов, можно положить, что $Y = B$. Таким образом, при выбранных параметрах поровой структуры образцов и условиях их нагружения $\sigma_c = \sigma_c(C_t, C_2/C_t)$, а $E = E(C_t)$.

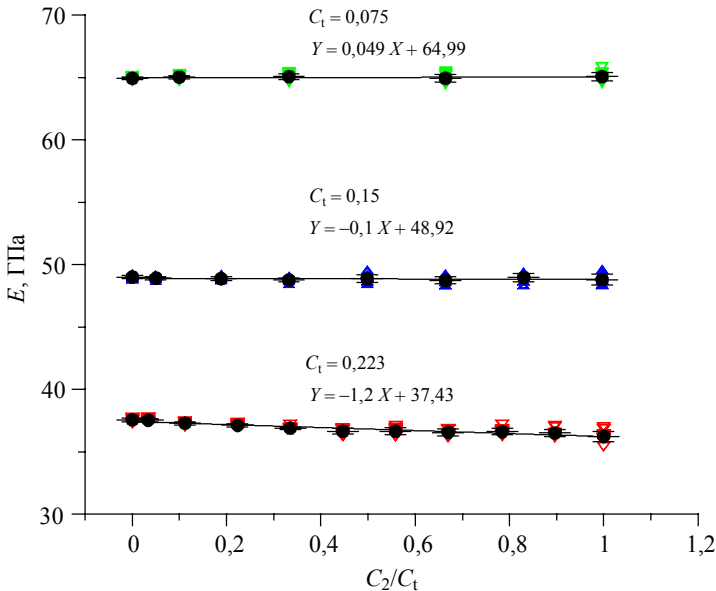


Рис. 4. Зависимости эффективного модуля сжатия модельных пористых образцов E от параметра C_2/C_t , характеризующего долю пористости второго максимума C_2 в общей пористости C_t , при значениях C_t : $C_{t1} = 0,075$, $C_{t2} = 0,15$, $C_{t3} = 0,223$

Одним из путей поиска зависимостей $K = K(C_t)$ и $B = B(C_t)$ является проведение серии расчетов по определению σ_c и E для образцов с различными значениями C_t и C_2 из рассматриваемого диапазона. Однако этот путь требует значительных вычислительных ресурсов. В связи с этим, был предложен другой способ поиска $K = K(C_t)$ и $B = B(C_t)$. Рассмотрим его только для случая прочностных свойств, так как он является более общим.

Суть предлагаемого подхода для нахождения оценки зависимостей $K = K(C_t)$ и $B = B(C_t)$ состоит в их аппроксимации по минимальному количеству точек и последующей проверке этих аппроксимаций для произвольно выбранных значений. Простейший вид нелинейной зависимости можно оценить по трем характерным точкам из рассматриваемого диапазона. Поэтому по трем точкам $(K_i; C_{ti}) = (84,34 \text{ МПа}, 0,075)$, $(108,59 \text{ МПа}, 0,15)$, $(141,36 \text{ МПа}, 0,223)$, и $(B_i; C_{ti}) = (739,29 \text{ МПа}, 0,075)$, $(558,22 \text{ МПа}, 0,15)$, $(459,34 \text{ МПа}, 0,223)$ удовлетворяющим искомым зависимостям, были подобраны аппроксимирующие их функции, тем самым определяя вид зависимостей $K = K(C_t)$, $B = B(C_t)$ и соответственно $Y = Y(C_t, C_2/C_t)$.

Далее корректность этих аппроксимаций проверялась проведением двух серий дополнительных расчетов для $C_{t_{test1}} = 0,1125$ и $C_{t_{test2}} = 0,1865$, построением для них соответствующих функций $Y = -KX + B$ и сравнением их коэффициентов с коэффициентами, найденными на основе аналитических оценок.

Наилучшей аппроксимации имеющихся точек $(K_i; C_{t_i})$ и $(B_i; C_{t_i})$ удалось добиться при использовании следующих функций (рис. 5 и 6):

$$K = 64,73 \exp(3,489 \cdot C_t); \quad (2)$$

$$B = -257,4 \ln(C_t) + 71,86, \quad (3)$$

где $0,075 \leq C_t \leq 0,223$. Подставляя (2) и (3) в (1), получаем искомую аналитическую зависимость прочностных свойств покрытия σ_c от параметров пористости C_1 и C_2/C_t :

$$\sigma_c = -64,73(C_2/C_t) \exp(3,489 C_t) - 257,4 \ln(C_t) + 71,86, \quad (4)$$

где $C_1 + C_2 = C_b$, $0 \leq C_1 \leq C_b$, $0 \leq C_2 \leq C_b$, $0,075 \leq C_t \leq 0,223$. Для зависимости эффективного модуля сжатия модельных пористых образцов от пористости аппроксимирующая аналитическая формула имеет вид

$$E = -8,85 \exp(-3,278 C_t), \quad (5)$$

где $0,075 \leq C_t \leq 0,223$.

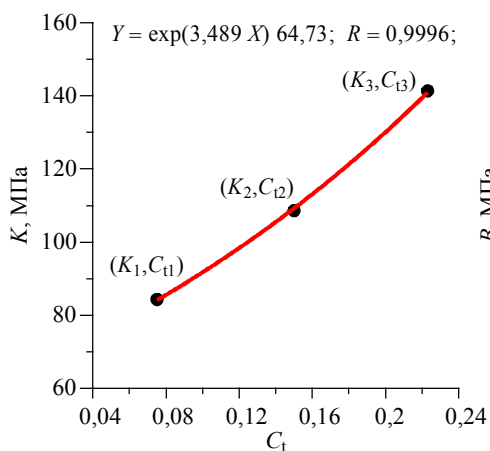


Рис. 5. Графическое представление функции $K = 64,73 \exp(3,489 C_t)$, аппроксимирующей три характерные расчетные точки $(K_i; C_{t_i})$

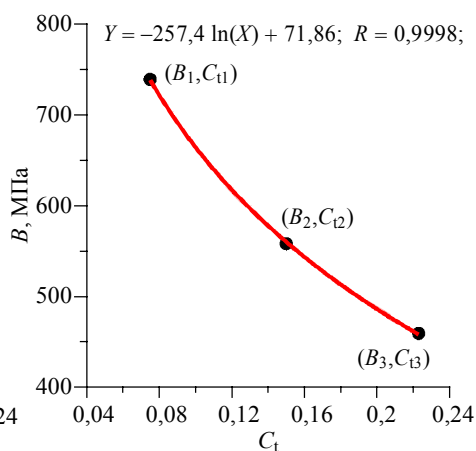


Рис. 6. Графическое представление функции $B = -257,4 \ln(C_t) + 71,86$ аппроксимирующей три характерные расчетные точки $(B_i; C_{t_i})$

Для верификации соотношения (4) были проведены дополнительные расчеты по оценке прочности пористых образцов σ_c для двух «промежуточных» значений общей пористости $C_{t_{test1}} = 0,1125$ и $C_{t_{test2}} = 0,1865$ из рассматриваемого диапазона $0,075 \leq C_t \leq 0,223$. Найденные две серии расчетных точек и соответствующие им аналитические зависимости (аппроксимирующие эти точки) для $C_{t_{test1}}$ и $C_{t_{test2}}$, а также зависимости для других значений общей пористости представлены на рис. 7.

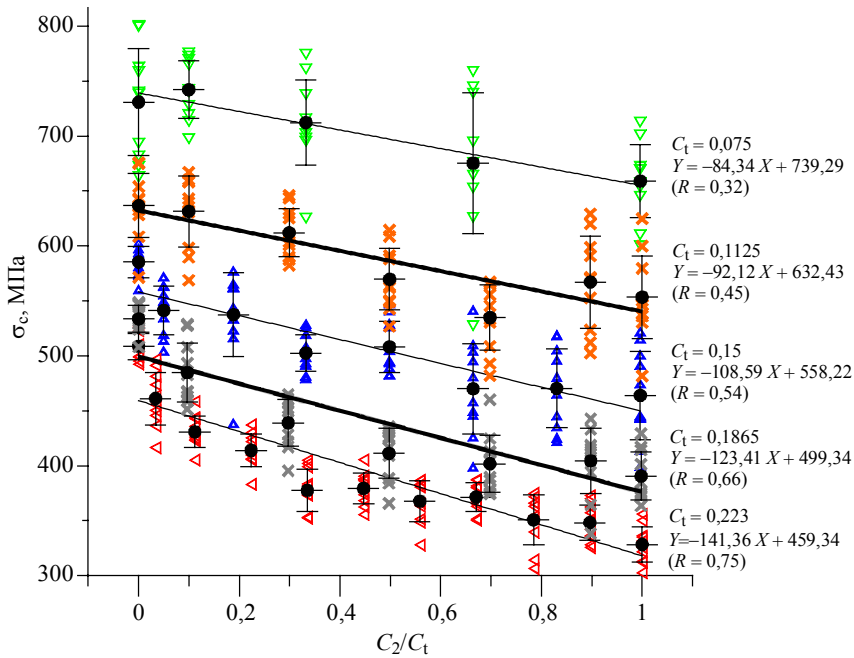


Рис. 7. Зависимости прочности модельных пористых образцов σ_c от параметра C_2/C_1 , характеризующего долю пористости второго максимума C_2 в общей пористости C_1 при значениях C_1 : $C_{t1} = 0,075$, $C_{t2} = 0,15$, $C_{t3} = 0,223$; и «промежуточных» значениях $C_{t_{test1}} = 0,1125$, $C_{t_{test2}} = 0,1865$

Видно, что результаты моделирования для «промежуточных» значений C_t также аппроксимируются линейными функциями вида $Y = -KX + B$. При этом аппроксимирующие прямые, соответствующие $C_{t_{test1}}$ и $C_{t_{test2}}$, с достаточной точностью совпадают с прямыми, построенными по результатам компьютерных вычислений.

Для количественного выражения этой точности были найдены коэффициенты $K = K(C_t)$ и $B = B(C_t)$ аналитической зависимости (4) прочностных свойств образцов σ_c от параметров пористости для значений $C_{t_{test1}}$ и $C_{t_{test2}}$. Их значения, а также значения коэффициентов K , B для функций, аппроксимирующих результаты вычислений при соответствующих значениях $C_{t_{test1}}$ и $C_{t_{test2}}$, приведены в таблице.

Значения коэффициентов функции $Y = -KX + B$ для случая аналитической оценки (4) и функций аппроксимирующих результаты компьютерных вычислений

	Коэффициенты для аналитической зависимости (4)		Коэффициенты для функций, аппроксимирующих компьютерные вычисления	
	$K = K(C_t)$	$B = B(C_t)$	$K = K(C_t)$	$B = B(C_t)$
$C_{t_{test1}} = 0,1125$	-95,845	634,228	-92,12	632,43
$C_{t_{test2}} = 0,1865$	-124,08	504,11	-123,41	499,34

Сопоставление соответствующих коэффициентов (4) с коэффициентами функций аппроксимирующих компьютерные вычисления (см. таблицу), показало, что разница между ними составляет менее 1 % (для коэффициентов $K = K(C_{t_{test1}})$ ~ 4 %). Проведение аналогичного сопоставления для коэффициентов $B = B(C_i)$ зависимости (5) показало, что разница между ними не превосходит 2,7 %, что является хорошим результатом для плоского случая при рассматриваемых значениях общей пористости образцов. Для решения поставленных в работе задач данная разница приемлема, что говорит о качественном и количественном соответствии рассматриваемых оценок. Этот результат подтверждает допустимость предложенных аппроксимаций (2) и (3), а следовательно, зависимости (4) и (5) могут использоваться для поиска прочностных свойств пористого покрытия в указанном диапазоне изменения параметров C_1 , C_2 , C_t . На основе этих оценок можно будет выбрать сочетание параметров пористости, оптимальное как с точки зрения механических свойств покрытия, так и с точки зрения требуемых от материала параметров поровой структуры.

Стоит отметить, что рассмотренная модель покрытия является многопараметрической, а именно, характеризуется формой пор, их пространственной ориентацией, функций распределения пор по размерам, величиной общей пористости. Справедливость предложенных оценок показана только для случая двух изменяющихся параметров C_t , C_2/C_t , и только в рассмотренном диапазоне значений отношения этих величин, поскольку именно они представляли наибольший интерес для исследования в двумерном случае (в трехмерном случае диапазон изменения параметров пористости может быть шире). Вопрос поиска границ всего диапазона значений параметров, где справедливы предложенные зависимости, а также учет влияния других параметров на прочностные и упругие свойства покрытий требует проведения дополнительных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Коноваленко Иг.С., Смолин А.Ю., Псахье С.Г. Многоуровневое моделирование деформации и разрушения хрупких пористых материалов на основе метода подвижных клеточных автоматов // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12. № 5. С. 29–36.
2. Псахье С.Г., Шилько Е.В., Смолин А.Ю. и др. Развитие подхода к моделированию деформирования и разрушения иерархически организованных гетерогенных, в том числе контрастных, сред // Физическая мезомеханика. 2011. Т. 14. № 3. С. 27–54.
3. Бужакова С.П. Свойства, структура, фазовый состав и закономерности формирования пористых наносистем на основе ZrO_2 : дис. ... докт. техн. наук. Томск, 2008. 309 с.
4. Global Roadmap for Ceramics: Proc. 2nd Int. Congress on Ceramics (ICC2) / eds. Alida Belosi and Gian Nicola Babini. Institute of Science and Technology for Ceramics, National Research Council, Verona (Italy), June 29 – July 4, 2008. 833 p.

Статья поступила 27.03.2013 г.

Konovalevko Ig.S., Smolin A.Yu., Konovalevko Iv.S., Promakhov V.V., Psakhie S.G. Computer-based study of THE DEPENDENCE OF mechanical properties of brittle porous material on the partial concentration of pores of different size. A two-dimensional model of a brittle porous material with bimodal pore size distribution is constructed in the context of the movable cellular automaton method. Based on numerical calculations, an analytical estimate for the dependence of strength and elastic properties of the material under compression on its total porosity and the partial porosities of pores of different size is proposed.

Keywords: numerical simulation, movable cellular automata method, strength and elastic properties, ceramics.

Konovalenko Igor Sergeevich (Institute of Strength Physics and Materials Science
of Siberian Branch Russian Academy of Sciences)
E-mail: igkon@ispms.tsc.ru

Smolin Alexey Yurievich (Institute of Strength Physics and Materials Science
of Siberian Branch Russian Academy of Sciences)
E-mail: igkon@ispms.tsc.ru

Konovalenko Ivan Sergeevich (Institute of Strength Physics and Materials Science
of Siberian Branch Russian Academy of Sciences)
E-mail: ivkon@ispms.tsc.ru

Promakhov Vladimir Vasiljevich (Institute of Strength Physics and Materials Science
of Siberian Branch Russian Academy of Sciences)
E-mail: vvpromakhov@mail.ru

Psakhie Sergey Grigorievich (Institute of Strength Physics and Materials Science
of Siberian Branch Russian Academy of Sciences)
E-mail: sp@ispms.tsc.ru