На правах рукописи

Зимина Валентина Алексеевна

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХРУПКИХ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Специальность 1.1.8. (01.02.04) Механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск – 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» и в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, доцент **Смолин Игорь Юрьевич**

Официальные оппоненты:

Светашков Александр Андреевич – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», профессор отделения общетехнических дисциплин школы базовой инженерной подготовки

Зайцев Алексей Вячеславович – кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», доцент кафедры «Механика композиционных материалов и конструкций»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Защита состоится «08» октября 2021 г. в 16 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета 24.1.135.01 (Д003.038.01) на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН), по адресу: 634055, г. Томск, пр. Академический, 2/4; ovs@ispms.ru

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФПМ СО РАН и на официальном сайте www.ispms.ru

Автореферат разослан «___» _____ 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор технических наук, профессор О.В. Сизова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

В настоящее время, благодаря своим свойствам хрупкие пористые материалы, такие как горные породы, бетоны и керамики, находят широкое применение практически во всех сферах деятельности человека. Особый интерес из этого класса хрупких материалов вызывают керамические материалы, которые отличаются привлекательными свойствами, включая механическую прочность, химическую стабильность, высокую проницаемость, низкую теплопроводность, малый вес и т.п. За последние десятилетия значимость пористых керамик возросла, благодаря их многочисленным применениям в химической, автомобильной, авиакосмической, медицинской и других отраслях промышленности.

Свойства этих материалов определяются их внутренней структурой, важнейшей составляющей которой является пористость, которая играет важную роль в практических приложениях изделий из пористых материалов. В зависимости от сферы применения и условий эксплуатации она может оказывать как положительное, так и отрицательное влияние на свойства и особенности механического поведения пористых материалов. Поэтому изучение влияния внутренней структуры хрупких пористых материалов на их физико-механические свойства является актуальной задачей для исследователей и инженеров.

Одной из важнейших задач механики деформируемого твердого тела является разработка методов прогнозирования механических свойств материалов и моделей их механического поведения в широких условиях воздействий. В случае пористых материалов такой прогноз необходимо производить с учетом особенностей их поровой структуры. Для решения этой задачи применяются аналитические, численные и комплексные экспериментально-численные исследования. Перспективным подходом для прогнозирования механического поведения хрупких пористых материалов в широких диапазонах внешних воздействий является многоуровневое компьютерное моделирование. Решение этой задачи позволит определять упругие и прочностные характеристики пористых материалов в зависимости от особенностей их поровой структуры без проведения испытаний на разрушение, и использовать эти данные в дальнейшем для инженерных расчетов изделий и конструкций из таких материалов, создавать изделия с оптимальными прочностными свойствами.

Степень разработанности темы исследования

Изучением процессов деформирования и разрушения, а также эффективных механических свойств хрупких пористых материалов, в частности керамик, занимаются во многих научных группах. В этих направлениях можно отметить вклад следующих исследователей: С.Н. Кульков, С.П. Буякова, А.Ю. Смолин, И.Ю. Смолин, П.В. Макаров, В.А. Скрипняк, Р.Р. Балохонов, В.А. Романова, В.С. Комлев, О.Л. Хасанов, М.Л. Качанов, И.Б. Севостьянов, A. Giraud, S. Meille,

T.Ohji, W. Pabst, G. Bruno, E. Garboczi, V. Le Corre, T. Sadowski и др. Причем, в последнее время растет доля численных исследований в этом направлении, что обусловлено не только возросшими возможностями вычислительной техники, но и совершенствованием математических моделей для описания процессов деформирования и разрушения хрупких материалов.

При моделировании механического поведения хрупких пористых материалов одной из важных задач является проблема формулировки определяющих соотношений. Описание связи напряжений с деформациями в области упругости для хрупких пористых материалов не вызывает трудностей в силу небольших значений упругих деформаций. Она является линейной, но сложной задачей является определение упругих модулей, которые зависят не только от степени пористости, но и от других параметров поровой структуры (размер, форма пор, расстояние между порами и т. д.). Для описания неупругой (необратимой) деформации и разрушения предложено множество различных моделей. Можно выделить модели, основанные на теории пластического течения и модели континуальной механики повреждений. Однако, несмотря на большое количество моделей, при численном решении прикладных задач по изучению поведения хрупких пористых материалов в сложных условиях нагружения, остается проблема выбора модели, наиболее точно описывающей неупругое поведение этих материалов. При практическом применении разработанных моделей важной задачей является определение их параметров. Для этого используются как экспериментальные методы, так и многоуровневое моделирование.

Многоуровневый подход является одним из бурно развивающихся направлений современного материаловедения и вычислительной механики в области исследования поведения перспективных конструкционных и функциональных материалов. В становлении и развитии этого направления огромный вклад внесли представители Томской научной школы академика В.Е. Панина, чьи работы в области физической мезомеханики материалов широко известны в России и за рубежом. Изучение особенностей деформирования и разрушения материалов с иерархической структурой на мезоуровне позволяет глубже понять физические механизмы прочности таких материалов и управлять свойствами вновь создаваемых материалов. Для хрупких пористых материалов процессы деформирования и разрушения на мезоуровне недостаточно подробно изучены.

Цели и задачи

Цель работы: разработать экспериментально-численный метод расчета эффективных механических характеристик хрупких пористых материалов и исследовать закономерности их механического поведения на примере пористой керамики.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

1. Разработать численные модели хрупких пористых материалов, включающие компьютерные геометрические модели поровой структуры, физико-математические модели среды и их компьютерную реализацию.

2. На основе численного моделирования механического поведения мезообъемов пористой керамики при одноосном растяжении и сжатии установить закономерности ее деформирования и разрушения.

3. Разработать метод расчета эффективных механических характеристик хрупких пористых материалов на основе экспериментальных данных об их поровой структуре и численных исследований их механического поведения.

4. Апробировать разработанный метод на пористой керамике, используя РЭМ-изображения ее структуры, результаты численного моделирования одноосного растяжения и сжатия ее мезообъемов, моделирования трехточечного изгиба образца керамики и результаты экспериментальных исследований.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Предложен новый вариант определяющих соотношений повреждаемых сред для описания особенностей разрушения упруго-хрупких материалов в зависимости от вида напряженного состояния.

2. Разработан и апробирован новый метод расчета эффективных механических характеристик изотропных хрупких пористых материалов на основе экспериментальных данных об их поровой структуре и моделирования механического отклика мезообъемов для случая плоского деформированного состояния в условиях одноосного растяжения и сжатия.

3. Определены эффективные механические характеристики для корундовой керамики, исследуемой в диссертационной работе.

4. Установлены закономерности изменения статистического распределения параметров напряженного состояния в процессе деформирования и разрушения мезообъемов пористых корундовых керамик.

Теоретическая значимость. Результаты диссертации имеют фундаментальный характер, разработанные метод и модели могут найти применение в дальнейших исследованиях по получению новых знаний о закономерностях деформирования и разрушения пористых керамик и других изотропных хрупких пористых материалов.

Практическая значимость. Предложенный в работе метод расчета эффективных механических характеристик хрупких пористых материалов имеет перспективу применения для пористых материалов разной природы, может быть использован при разработке новых материалов с заданными свойствами, а также в инженерных расчетах изделий из таких материалов. Полученные в ходе выполнения диссертационной работы результаты могут использоваться в специальных курсах по механике деформируемого твердого тела и вычислительной механике при

подготовке магистрантов по направлению 15.04.03 – Прикладная механика в Томском государственном университете и других университетах.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук Российской Федерации на 2013-2020 годы: проект III.23.2.3. «Разработка научных основ синтеза и исследование свойств иерархически организованных хрупких пористых материалов (2016 г.)», проект III.23.2.3. «Разработка научных основ синтеза и исследование свойств материалов с иерархически организованной внутренней структурой на основе оксидов, боридов, карбидов (2017-2020 гг.)», проект III.23.2.12. «Многокомпонентные материалы и структуры, в том числе синтезируемые аддитивными методами: разработка связанных термо-механо-химических моделей, изучение функциональных свойств и особенностей механического поведения при интенсивных внешних воздействиях (2018-2020 гг.)»; Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского Томского государственного университета (ведущих университетов Российской Федерации), проект № 8.2.12.2017 «Развитие моделей и методов многоуровневого динамического моделирования материалов и элементов конструкций с учетом структуры материалов и контактных взаимодействий».

Методология и методы исследования. В работе использовался комплекс экспериментальных и компьютерных методов исследований. Выполнение экспериментальных исследований механического поведения керамических образцов в условиях трехточечного изгиба было произведено на испытательной машине «Instron-1185». Для исследования внутренней структуры образцов был использован электронный сканирующий микроскоп Vega 3 LMU. Для анализа и обработки изображений внутренней структуры образцов, а также для составления их компьютерных геометрических моделей на мезоуровне использовалась программа с открытым исходным кодом ImageJ. Численное исследование деформирования и разрушения хрупких пористых материалов выполнено с использованием конечно-разностного метода М.Л. Уилкинса. Для обработки результатов моделирования применялись следующие свободно распространяемые программы ParaView, VisIt, Gnuplot и GNU Image Manipulation Program (GIMP).

Положения, выносимые на защиту:

1. Модель упруго-хрупкой повреждаемой среды, отличающаяся тем, что позволяет учесть влияние вида напряженного состояния на накопление повреждений и деградацию упругих свойств с накоплением повреждений при моделировании механического поведения хрупких пористых материалов.

2. Метод расчета эффективных механических характеристик (упругих модулей, пределов прочности при растяжении и сжатии, параметров модели Друкера–Прагера) изотропных хрупких пористых материалов по результатам численного моделирования одноосного растяжения и сжатия в условиях плоского деформированного состояния их мезообъемов на основе реальных изображений их поровой структуры.

3. Результаты экспериментально-численных исследований на основе разработанного метода расчета эффективных механических характеристик для изотропных хрупких пористых материалов, позволившие определить эффективные значения модуля Юнга корундовой керамики с точностью до 8 % и предела прочности при изгибе с точностью до 1,5 %.

Степень достоверности результатов. Достоверность полученных результатов обеспечивается применением проверенного современного оборудования и экспериментальных методов, использованием апробированных численных методов, математической корректностью постановки задачи, проведением тестовых расчетов для верификации моделей и компьютерной программы, согласованностью полученных численных результатов с результатами экспериментальных исследований, а также с результатами, опубликованными в научных источниках.

Апробация результатов. Основные результаты и положения диссертационной работы были представлены на следующих научных конференциях и семинарах: Международной научной молодежной конференции «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики» (г. Томск, 2017 г., 2018 г.), Международной научно-технической молодежной конференции "Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения" (г. Томск, 2018 г.), Международной конференции «Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций» (г. Томск, 2018 г., 2020 г.), Международной научной конференции студентов и молодых ученых «Молодежь, наука, технологии: новые идеи и перспективы» (г. Томск, 2017 г.), Международной конференции «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (г. Екатеринбург, 2018 г.), International Conference on Competitive Materials and Technology Processes (Miskolc-Lillafüred, Hungary, 2018 г.), Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (г. Алушта, Крым, 2019 г.), International Conference on Rheology and Modeling of Materials (Miskolc-Lillafüred, Hungary, 2019 г.), International scientific workshop «Functional ceramic composite materials» (Miskolc, Hungary, 2019 г.), Международной конференции по Прикладной математике и механике в аэрокосмической отрасли (г. Алушта, Крым, 2020 г.).

Публикации. Результаты работы представлены в 8 публикациях, из них 2 статьи в рецензируемых изданиях, включенных в перечень ВАК, 6 статей в журналах, индексируемых в базах научного цитирования Web of Science и Scopus.

Личный вклад автора состоит в написании литературного обзора по теме диссертации, модификации расчетной программы, участии в проведении экспериментов, самостоятельной обработке результатов экспериментов, составлении компьютерных моделей мезообъемов образцов, проведении численных расчётов, анализе полученных результатов, в написании статей по теме диссертации. Постановка цели и задач исследования, а также формулировка выводов и положений, выносимых на защиту, проводились совместно с научным руководителем.

Соответствие паспорту заявленной специальности. Диссертационная работа по содержанию и методам исследования соответствует пунктам 3 «Мезомеханика многоуровневых сред со структурой», 7 «Постановка и решение краевых задач для тел различной конфигурации и структуры при механических, электромагнитных, радиационных, тепловых и прочих воздействиях, в том числе применительно к объектам новой техники», 8 «Математические модели и численные методы анализа применительно к задачам, не допускающим прямого аналитического исследования» паспорта специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела, физико-математические науки.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 141 странице, в том числе содержит 39 иллюстраций, 8 таблиц, список литературы представлен 180 источниками.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы и степень ее разработанности, сформулированы цель и задачи работы, показана научная новизна результатов, теоретическая и практическая значимость работы, перечислены методы исследования, сформулированы основные положения, выносимые на защиту. Приведена информация о степени достоверности и об апробации результатов, о личном вкладе автора. Представлено краткое изложение диссертационной работы по главам.

Первая глава имеет обзорный характер. В ней рассмотрены основные свойства хрупких пористых материалов, сферы их применения, а также основные характеристики пористой структуры. Описаны основные экспериментальные методы исследования пористых структур и способы их количественного описания. Также в ней содержится обзор как классических, так и современных моделей неупругого деформирования и процессов разрушения хрупких материалов, в том числе и пористых керамик. Представлено современное состояние исследований, посвященных проблемам описания механического поведения пористых хрупких материалов (неупругое деформирование, накопление повреждений, разрушение), а также описаны методы и подходы для прогнозирования их эффективных свойств.

Во второй главе представлена общая математическая постановка задачи, сформулированы применяемые модели определяющих соотношений, описан численный метод решения и приведены тестовые расчеты для верификации используемого программного комплекса и реализации рассмотренных моделей в нем. В конце главы представлена методика усреднения упругих модулей пористых материалов для случая одноосного нагружения в условиях плоской деформации.

В работе механическое поведение материала описывается системой уравнений механики деформируемого твердого тела, которая включает в себя основные законы сохранения, геометрические и определяющие соотношения. Уравнения записаны в рамках подхода Лагранжа к описанию движения сплошной среды.

В декартовой системе координат законы сохранения массы, количества движения и энергии имеют вид:

$$\rho_0 V_0 = \rho V \ , \quad \rho \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x^j}, \quad \frac{dE}{dt} = \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} \ ,$$

где ρ_0 и ρ – начальное и текущее значения плотности материала; V_0 и V – начальное и текущее значения бесконечно малого объема среды; v_i – компонента вектора скорости перемещений; x^j – пространственная координата; σ_{ij} – компонента тензора истинных напряжений Коши; $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – компонента тензора скорости деформации; E – удельная (на единицу массы) внутренняя энергия; $i, j = 1, 2, 3$ для трехмерных задач.

Геометрические соотношения имеют вид:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x^j} + \frac{\partial v_j}{\partial x^i} \right), \ \dot{\omega}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x^j} - \frac{\partial v_j}{\partial x^i} \right),$$

где $\dot{\omega}_{ij}$ – компонента тензора скорости вращения.

Точка сверху символов обозначает материальную производную по времени. Тензор напряжений записан как сумма шаровой (давление P) и девиаторной (s_{ij}) частей: $\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + s_{ij}$, где δ_{ij} – символ Кронекера.

Описание механического поведения хрупких пористых материалов на мезоуровне проводилось с использованием двух моделей определяющих соотношений: модели изотропной упруго-хрупкой повреждаемой среды и упругопластической модели Друкера–Прагера. Для описания упругого отклика в обеих моделях используются уравнения гипоупругости для изотропного материала:

$$\dot{P} = -K\dot{\theta}, \ \dot{s}_{ij} = 2G\left[\dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{1}{3}\dot{\theta}\delta_{ij} \right] - s_{ik}\dot{\omega}_{kj} + s_{kj}\dot{\omega}_{ik} \ ,$$

где K – модуль объемной упругости; $\theta = \varepsilon_{ii}$ – объемная деформация; G – модуль сдвига.

В модели повреждаемой среды кинетика накопления повреждений имеет вид:

$$\frac{dD(t)}{dt} = \frac{\left[H(\mu_\sigma)(\sigma - \sigma_0^c)^2 + (1 - H(\mu_\sigma))(\sigma - \sigma_0^t)^2 \right]}{\sigma_*^2 \left[H(\mu_\sigma) t^c + (1 - H(\mu_\sigma)) t^t \right]}, \qquad \sigma = -\alpha P + \sqrt{J_2} \ .$$

Здесь μ_σ – параметр Лоде–Надаи; $H(\mu_\sigma)$ – функция Хевисайда; $J_2 = 0{,}5(s_{ij}s_{ij})$ – второй инвариант тензора девиатора напряжений; σ_0^t, σ_0^c – значения напряжений в областях растяжения и сжатия соответственно, по достижению которых в материале начинают копиться повреждения ($\sigma_0^t << \sigma_0^c$); t^t, t^c – временные параметры, определяющие характерные времена накопления повреждений в условиях растяжения и сжатия соответственно; $\sigma_* = \sigma_{0*}(1.01 + \mu_\sigma)^2$, σ_{0*} – параметр модели, имеющий размерность напряжений; σ – эквивалентные напряжения, рассчитанные по модели Друкера–Прагера; α – коэффициент внутреннего трения.

Использование первого и третьего инвариантов тензора напряжений в уравнении для кинетики накопления повреждения позволяет описать разное сопротивление сжатию и растяжению, характерное для хрупких пористых материалов.

В данной работе рассмотрена модификация модели повреждаемой среды, предложенной П. В. Макаровым с соавторами. Изменение состоит в том, что накопленная поврежденность D оказывает влияние на деградацию не прочностных свойств, а упругих модулей:

$$G = G_0(1-D), \quad K = K_0(1-D),$$

где нижним индексом «0» обозначены упругие модули неповрежденного материала.

В случае модели упругопластической среды используется функция текучести Друкера–Прагера с неассоциированным законом пластического течения:

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{p} = \dot{\lambda}\frac{\partial g(\sigma_{ij})}{\partial \sigma_{ij}}, \quad \text{если } f(\sigma_{ij}) \geq 0,$$

$$f(\sigma_{ij}) = \sqrt{J_2} - \alpha P - Y = 0, \qquad g(\sigma_{ij}) = \sqrt{J_2} - \beta P,$$

где $f(\sigma_{ij})$ – функция текучести; Y – сдвиговая прочность материала (или сцепление); $\dot{\lambda}$ – безразмерный скалярный множитель, который равен нулю при $f(\sigma_{ij}) < 0$ и имеет положительное значение при $f(\sigma_{ij}) = 0$, такое, чтобы удовлетворить условию текучести; $g(\sigma_{ij})$ – пластический потенциал; β – коэффициент дилатансии.

При этом соотношения гипоупругости запишутся с учетом аддитивного разложения тензора скоростей деформации на упругую и пластическую составляющие.

Для описания разрушения в случае модели повреждаемой среды используется критерий по предельному значению поврежденности. Если применяется упругопластическая модель, то используются критерии по предельному значению накопленной неупругой деформации и по предельному значению растягивающего давления. После выполнения критерия разрушения материал перестает сопротивляться растяжению и сдвигу, но продолжает сопротивляться сжатию.

Начальные условия соответствовали отсутствию напряжений. Для каждого случая конкретной решаемой задачи граничные условия записывались согласно специфике рассматриваемой задачи.

Для компьютерного изучения процессов деформирования и разрушения исследуемых объектов использовали конечно-разностный численный метод решения дифференциальных уравнений механики деформируемого твердого тела.

Эффективные упругие модули хрупких пористых материалов определялись по результатам моделирования одноосного нагружения их мезообъемов в условиях плоской деформации. Для этого была разработана соответствующая методика, использующая линейную аппроксимацию зависимостей усредненных по объему

значений соответствующих параметров напряженного и деформированного состояний.

Используя обобщенный закон Гука были получены выражения для определения эффективных значений модулей объемной упругости K и сдвига G:

$$K = -\frac{\Delta < P >}{\Delta < \theta >}, \quad G = \frac{\Delta < \sigma_i >}{3\Delta < \varepsilon_i >},$$

где σ_i, ε_i – интенсивность напряжений и деформаций, соответственно; Δ означает приращение, угловые скобки означают усреднение по объему.

Эффективное значение модуля Юнга рассчитывалось с использованием закона Гука для одноосного растяжения вдоль оси OX в условиях плоской деформации:

$$E = < \sigma_{xx} > \frac{(1 - < \nu >^2)}{< \varepsilon_{xx} >},$$

где σ_{xx}, ε_{xx} – значения напряжения и деформации вдоль оси OX.

Для расчета эффективного значения коэффициента Пуассона использовалась формула, полученная для усредненных значений компонент тензора деформаций при одноосном нагружении в условиях плоской деформации:

$$\nu = \frac{< \varepsilon_{yy} >}{< \varepsilon_{yy} > - < \varepsilon_{xx} >}.$$

В третьей главе содержится описание метода экспериментально-численного определения механических характеристик хрупких пористых материалов, а также результаты экспериментальных и численных исследований структуры, свойств и механического поведения хрупких пористых керамик.

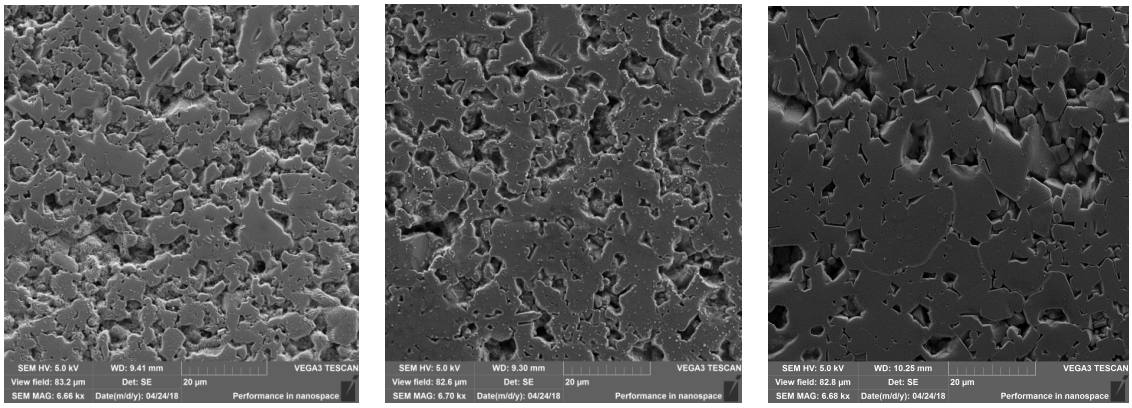
Предложенный метод заключается в построении мезомасштабных компьютерных моделей пористых материалов на основе экспериментальных данных об их поровой структуре и последующем использовании этих компьютерных моделей для моделирования поведения материала при одноосном растяжении и сжатии. Эффективные упругие характеристики пористых материалов определялись при помощи методики, описанной в главе 2. Эффективные прочностные характеристики, а именно пределы прочности при одноосном сжатии σ_c и растяжении σ_t определялись по пикам на усредненных σ–ε диаграммах. Используя их, были рассчитаны эффективные параметры модели Друкера–Прагера. Для этого были выведены формулы, учитывающие условия плоской деформации:

$$Y = \frac{2\sigma_c \sigma_t \sqrt{1 - \nu + \nu^2}}{\sqrt{3}\,(\sigma_c + \sigma_t)}, \quad \alpha = \frac{\sigma_c - \sigma_t}{\sigma_c + \sigma_t} \frac{\sqrt{3(1 - \nu + \nu^2)}}{1 + \nu}.$$

Исходя из условий нагружения для определения этих параметров, область их применения ограничивается значениями давлений, находящимися в диапазоне от половины предела прочности при растяжении (отрицательные значения) до половины предела прочности при сжатии (положительные значения).

Для экспериментальных исследований были изготовлены образцы в виде прямоугольных параллелепипедов из технически чистого порошка Al_2O_3 методом шликерного литья, которые спекались при температурах 1400 ºС, 1500 ºС, 1600 ºС, и определена их пористость.

Методом растровой электронной микроскопии получены изображения поровой структуры спеченных образцов (рисунок 1) и на их основе построены распределения пор по размерам.



а *б* *в*

а – 1400 °С; *б* – 1500 °С; *в* – 1600 °С

Рисунок 1 – Снимки поверхности образцов корундовой керамики спеченных при различных температурах

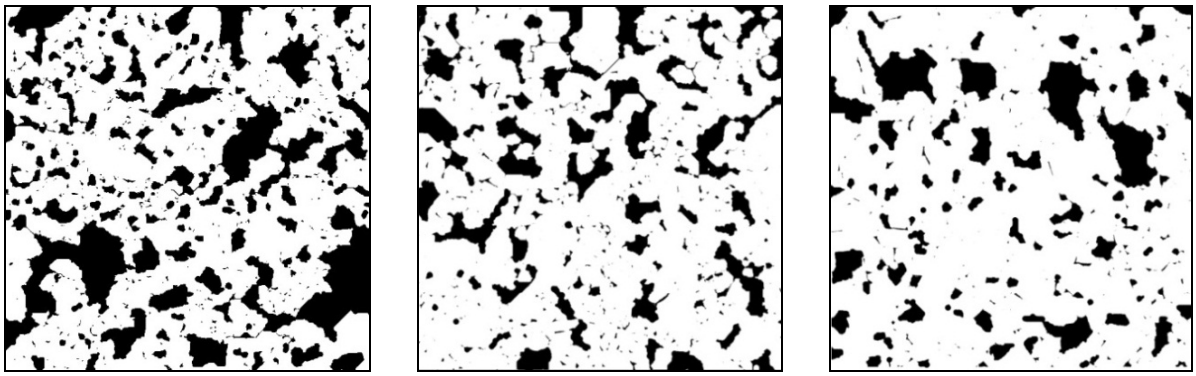
Для определения предела прочности при изгибе и модуля Юнга пористой керамики были выполнены эксперименты на трехточечный изгиб для 6 образцов из каждой серии. Результаты представлены в таблице 1. Видно, что значения предела прочности при изгибе и модуля Юнга увеличиваются с уменьшением значения пористости в образцах. При этом среднее квадратическое отклонение для пористости находится в диапазоне 2–6 %, для модуля Юнга – 9–16 %, а предела прочности при изгибе – 6–20 %.

Таблица 1 – Экспериментально определенные характеристики корундовой керамики

Температура спекания, °С	Пористость, %	Предел прочности при изгибе σ, МПа	Модуль Юнга *E*, ГПа
1400	33,0±0,7	138±27	58±7
1500	25,7±0,6	243±14	80±13
1600	17,4±1	265±35	173±16

По изображениям поровых структур (см. рисунок 1) были построены двухмерные компьютерные геометрические модели структуры мезообъемов (рисунок 2) и определена их пористость с использованием цифровых методов обработки этих изображений. Для каждого значения пористости было построено несколько компьютерных моделей мезообъемов на основе различных фотографий. Среднее значение пористости исследуемых мезообъемов составило 33 %, 26 % и

17 % соответственно. Далее эти компьютерные модели мезообъемов использовались для проведения моделирования их механического поведения при одноосном растяжении в двумерной постановке в условиях плоской деформации.



а *б* *в*

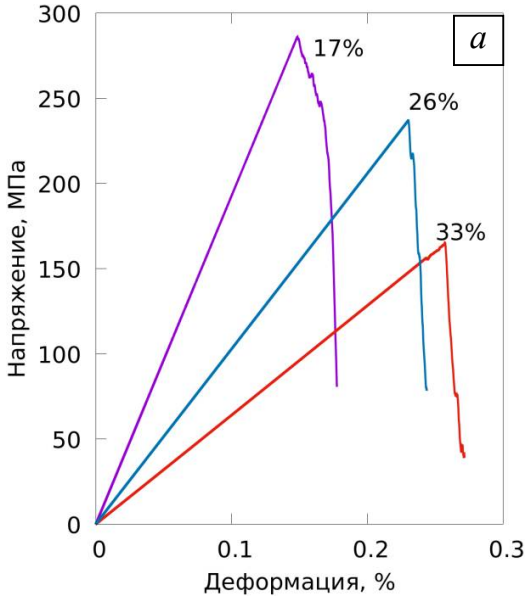
Поры отмечены черным цветом, пористость составляет: *а* – 33 %; *б* – 26 %; *в* – 17 %

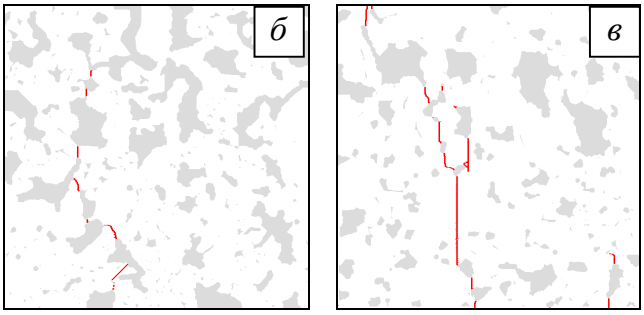
Рисунок 2 – Примеры компьютерных моделей пористых керамических структур

Для каркаса (белый цвет на рисунке 2) были приняты физико-механические характеристики, соответствующие беспористому Al_2O_3.

По результатам моделирования механического поведения мезообъемов построены усредненные σ–ε диаграммы. На вертикальной оси отложены усредненные значения компоненты тензора напряжений σ_{xx}, на горизонтальной – относительное удлинение образца вдоль оси нагружения.

На рисунке 3 представлены результаты моделирования с применением модели упруго-хрупкой повреждаемой среды для мезообъемов, изображенных на рисунке 2.





а – σ–ε диаграммы; *б, в* – картины разрушения мезообъемов с пористостью 26 % и 17 % соответственно

Рисунок 3 – Результаты численного моделирования мезообъемов пористой керамики в условиях растяжения

Видно, что все диаграммы имеют падающую ветвь, характерную для стадии разрушения хрупких материалов. Отмечается возрастание модуля Юнга и предела прочности материала с уменьшением пористости в материале.

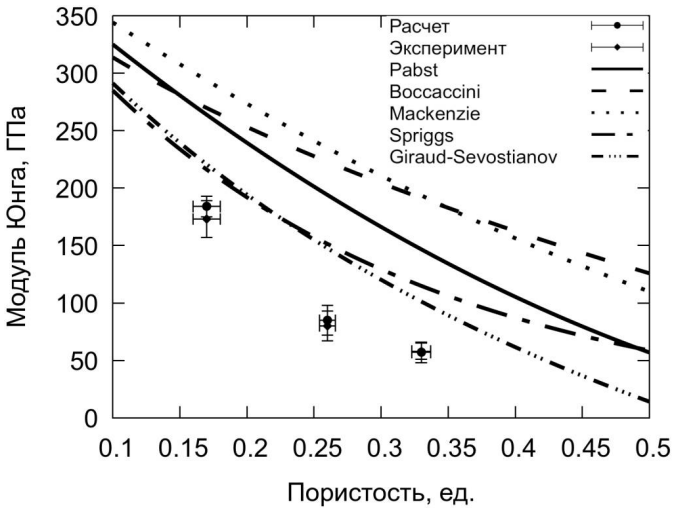


Рисунок 4 – Зависимости модуля Юнга от значения пористости для корундовой керамики: теоретические модели, экспериментальные и расчетные данные

На картинах разрушения мезообъемов (см. рисунок 3, *б*, *в*) зарождение трещин происходит в местах сильных концентраторов напряжений, которые обусловлены расположением и формой пор. Распространение трещин происходит в направлении, перпендикулярном оси приложения растягивающей нагрузки *OX*. Данный характер разрушения является типичным для хрупких материалов.

На рисунке 4 представлены значения модуля Юнга для исследованных образцов корундовой керамики, полученные в эксперименте и при моделировании, в сравнении с известными теоретическими зависимостями модуля Юнга от значения пористости. Видно, что вычисленные значения модуля Юнга по предложенной методике совпадают с экспериментальными значениями с ошибкой до 6 %, а теоретические модели хуже описывают экспериментальные данные и их погрешность составляет от 28 % и выше.

В таблице 2 представлены значения эффективных упругих модулей и предела прочности при растяжении пористой керамики, вычисленные из диаграмм нагружения с помощью разработанной методики, описанной в главе 2. Отличия рассчитанных средних значений предела прочности при растяжении от экспериментальных значений составляют от 3 % до 8 %, для модуля Юнга – 2 – 6 %.

Таблица 2 – Физико-механические характеристики керамики на основе Al_2O_3

Пористость, %	Предел прочности при растяжении σ_t, МПа	Модуль Юнга *E*, ГПа	Коэффициент Пуассона, ν	Модуль объемной упругости *K*, ГПа	Модуль сдвига *G*, ГПа
33±0,7	150±13	57±9	0,19±0,02	31±5	23±4
26±0,6	236±7	85±13	0,21±0,02	49±7	35±6
17±1	286±17	184±9	0,22±0,02	109±12	75±4

Для оценки неоднородного напряженного состояния в мезообъеме пористых керамик было проанализировано поле компоненты тензора напряжений вдоль оси нагружения (σ_{xx}) (рисунки 5, 6). Видно, что в случае одноосного растяжения мезообъемов наблюдаются как положительные, так и отрицательные напряжения (рисунок 6). Величина разброса значений напряжений достигает 5–9 ГПа перед образованием трещин. Хорошо выделяются участки упругого деформирования,

распространения трещин и разрушения. При зарождении первой трещины на графиках, представленных на рисунках 5, 6 появляются осцилляции, причем в это время на усредненной σ–ε диаграмме (см. рисунок 3, *а)* еще продолжается участок линейного роста напряжений.

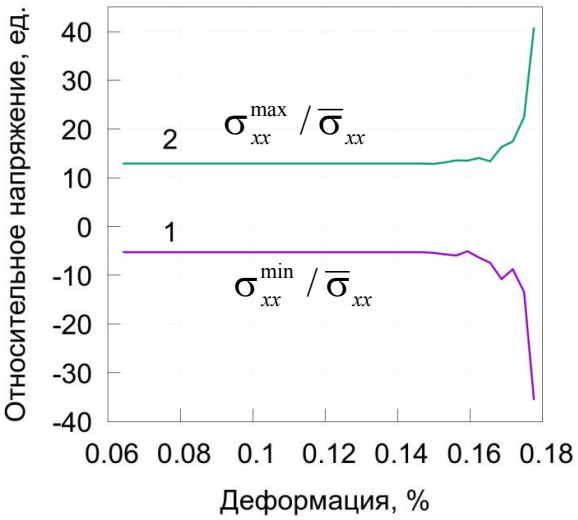


Рисунок 5 – Разброс относительных значений напряжений в мезообъемах с пористостью: 17 % в зависимости от относительной деформации

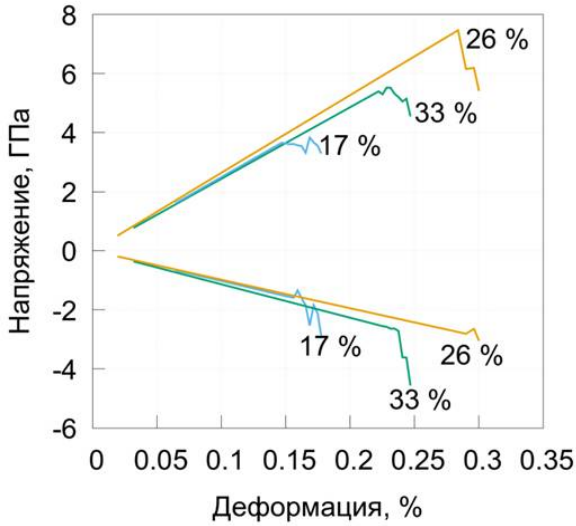
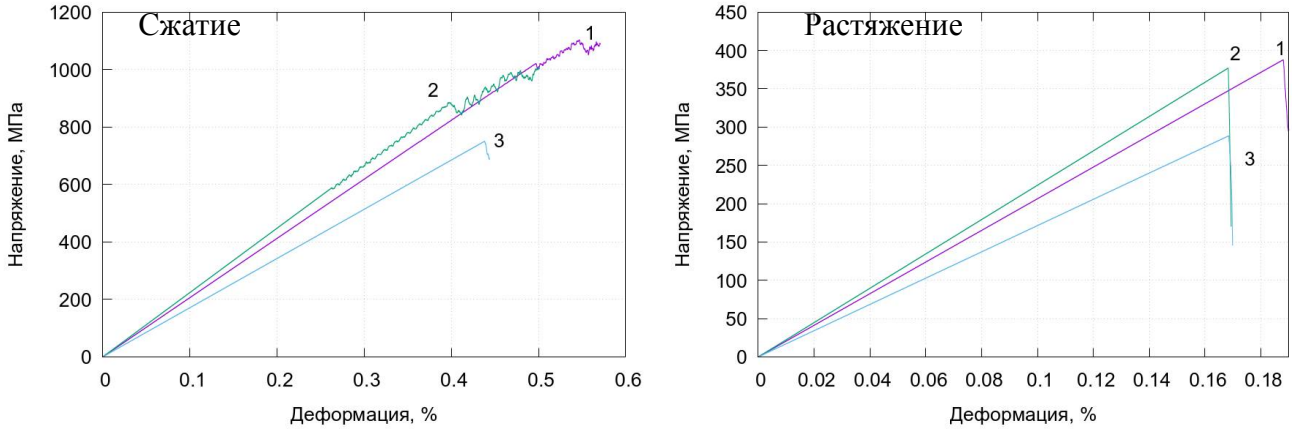


Рисунок 6 – Разброс локальных значений напряжений σ_{xx} в зависимости от относительной деформации мезоообъемов с различными значениями пористости

В конце третьей главы представлены результаты многоуровневого моделирования механического поведения пористой керамики в условиях трехточечного изгиба с применением модели Друкера–Прагера. На мезоуровне было выполнено моделирование механического поведения различных мезообъемов пористой керамики со средним значением пористости 16,7±0,7 % на одноосное растяжение и сжатие в условиях плоской деформации (рисунок 7).



Цифры 1, 2, 3 на графиках соответствуют разным мезообъемам
Рисунок 7 – Кривые деформирования при разных условиях нагружения

На основе предложенного метода, были вычислены эффективные механические характеристики, их средние значения для исследуемых мезообъемов представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Эффективные физико-механические характеристики корундовой керамики с пористостью 16,7 %

ρ, г/см^3	*K*, ГПа	*G*, ГПа	*Y*, МПа	α
2,697	97	64	200	0,758

Эти характеристики использовались для задания свойств материала на макроуровне при моделировании механического поведения образца в форме прямоугольного параллелепипеда в условиях трехточечного изгиба в трехмерной постановке.

При сравнении экспериментальных диаграмм нагружения с диаграммой, полученной при численном моделировании на макроуровне видно, что наклон расчетной диаграммы нагружения наиболее близок к экспериментальным диаграммам нагружения для образцов под номерами 1 и 9 (рисунок 8). Среднее значение модуля Юнга, определенное из численного моделирования составило 158 ГПа. Это значение на 8 % отличается от среднего значения модуля Юнга, полученного в результате проведенных экспериментов (173±16 ГПа). При этом разница между средним значением предела прочности при изгибе в эксперименте и расчетным значением составляет 1,5 %. Среднее значение прочности при изгибе, в результате проведенных экспериментов, составляло 265 МПа, а в расчетах – 261 МПа.

Анализ картин макроскопического разрушения образцов в результате численного моделирования (рисунок 9, а) и эксперимента (рисунок 9, б) показал их качественное и количественное согласие. Для количественного сравнения результатов был рассчитан относительный путь трещины λ ($\lambda = a/w$, a – путь трещины, w – высота образца) как в эксперименте, так и в численном расчете: $\lambda_{эксп}$=1,16, $\lambda_{расч}$=1,2, эти величины отличаются на 3,4 %.

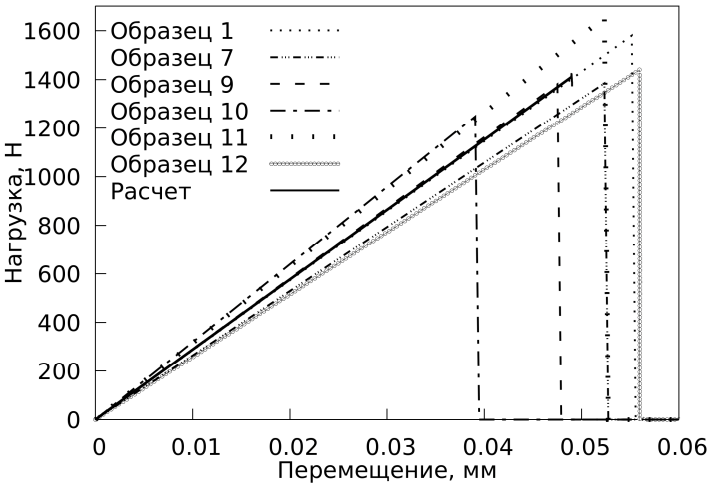
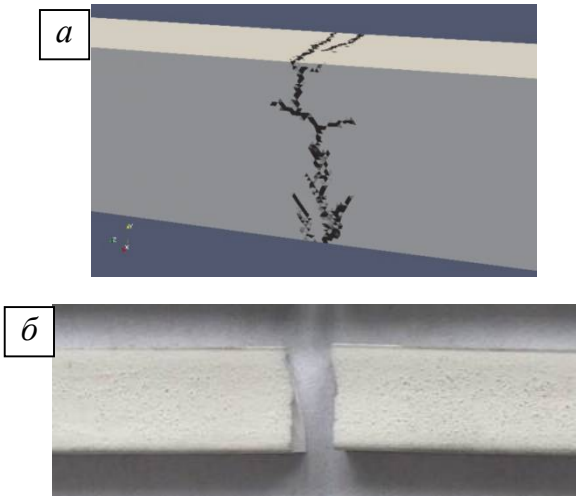


Рисунок 8 – Диаграммы нагружения полученные при численном и экспериментальном исследовании



а – моделирование; *б* – эксперимент
Рисунок 9 – Макроскопическое разрушение образца

Таким образом, предложенный метод расчета эффективных механических характеристик хрупких пористых материалов был апробирован по результатам многоуровневого моделирования и сравнении с экспериментальными данными, полученными в результате испытаний образцов корундовой керамики на трехточечный изгиб. Данный метод может быть использован и для более широкого класса структурно-неоднородных материалов: эффективные упругие характеристики могут быть определены не только для хрупких материалов, но и для пластичных материалов; эффективные прочностные характеристики могут быть определены не только для пористых материалов, но и для других хрупких изотропных материалов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Построены компьютерные модели (модельные объемы) пористых корундовых керамик на основе оригинальных экспериментальных данных о поровой структуре, полученных с использованием растровой электронной микроскопии.

2. Предложен метод расчета эффективных упругих и прочностных характеристик изотропных хрупких пористых материалов. Метод включает в себя построение геометрических моделей по экспериментальным изображениям поровой структуры, двумерный расчет механического поведения пористых материалов, осреднение полученных параметров напряженно-деформированного состояния и получение эффективных характеристик исследуемого пористого материала. Полученные характеристики могут быть использованы для расчета изделий и конструкций из этих материалов.

3. На основе экспериментальных исследований выявлен нелинейный рост модуля Юнга и предела прочности при изгибе с увеличением температуры спекания образцов в диапазоне от 1400 ºС до 1600 ºС и, соответственно, с уменьшением пористости образцов с 33 % до 17 %. Отмечен увеличенный разброс значений модуля Юнга (9–16 %) и предела прочности при изгибе (6–20 %) по сравнению с разбросом значений пористости образцов спеченных при одинаковых значениях температуры (6 %), что свидетельствует о влиянии не только значений пористости, но и других характеристик поровой структуры на механические свойства пористых керамик.

4. Предложена модификация модели упруго-хрупкой повреждаемой среды, отличающаяся тем, что упругие модули деградируют с увеличением параметра поврежденности, который рассчитывается на основе эквивалентных напряжений для модели Друкера–Прагера и критических напряжений, зависящих от параметра Лоде–Надаи, что позволяет учесть вид напряженного состояния и описать различие в поведении хрупких материалов при сжатии и растяжении. При выборе параметров этой модели необходимо учитывать, что в структурно-неоднородной среде локальные значения напряжений на порядок превышают средние значения по мезообъему, что показано в результате выполненных расчетов. Так, например, в случае одноосного растяжения мезообъемов пористой корундовой керамики в них

присутствуют как растягивающие, так и сжимающие локальные напряжения, максимальный разброс между которыми достигает 9 ГПа перед началом разрушения в керамиках с пористостью 26 %. (т.е. в 35 раз превышает эффективный предел прочности при растяжении).

5. В результате многоуровневого моделирования механического поведения пористой корундовой керамики продемонстрирована работоспособность моделей и метода на основе сравнения экспериментальных и теоретических данных испытаний образцов в условиях трехточечного изгиба. Разброс средних значений предела прочности при изгибе в эксперименте и численном расчете составил 1,5 %, а расчетное среднее значение модуля Юнга отличается на 8 % от экспериментального среднего значения для изученных керамических образцов с пористостью 16,7±0,7 %.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК:

1. **Микушина*, В.А.** Численное моделирование деформирования и разрушения пористой алюмооксидной керамики на мезоуровне / В.А. Микушина, И.Ю. Смолин // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2019. – №. 58. – С. 99–108.

2. **Зимина, В.А.** Экспериментальное исследование структуры, упругих и прочностных характеристик пористой корундовой керамики / В.А. Зимина // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2020. – №. 67. – С. 117–126.

Статьи в изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus:

3. **Mikushina*, V.A.** Experimental and numerical investigation of mechanical behavior of porous ceramic materials in three-point bending / V.A. Mikushina, I.Yu. Smolin, A.S. Kulkov, M.O. Eremin // AIP Conference Proceedings. – 2018. – Vol. 2051. – P. 020192-1–020192-4.

4. Kulkov, A.S. Investigation of mechanical response of Al_2O_3 ceramic specimens to loading with consideration for their structural features / A.S. Kulkov, I.Yu. Smolin, **V.A. Mikushina*** // AIP Conference Proceedings. – 2018. – Vol. 2051. – P. 020162-1–020162-4.

5. **Mikushina*, V.A.** Simulation of mesoscopic fracture of ceramics with hierarchical porosity / V.A. Mikushina, I.Yu. Smolin // AIP Conference Proceedings. – 2018. – Vol. 2053. – P. 030041-4–030041-4.

6. **Mikushina*, V.A.** Investigation of mechanical properties of porous alumina ceramics: experiment and simulation / V.A. Mikushina, I.Yu. Smolin, A.S. Kulkov // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 613, Article 012026. – P. 1–4.

7. Eremin, M. Investigation of failure mechanism of Al2O3 specimens subjected to three-point bending test / M. Eremin, A. Kulkov, I. Smolin, **V. Mikushina*** // Frattura ed Integrità Strutturale. – 2019. – Vol. 13, №. 50. – P. 38–45.

8. **Mikushina*, V.A.** Numerical analysis of the stress state and fracture of porous ceramics at the mesolevel / V.A. Mikushina, I.Yu. Smolin // Journal of Physics: Conf. Series. – 2019. – Vol. 1214. – P. 012016-1–012016-8.

***Фамилия изменена в связи с регистрацией брака.**