

01;05.1

О возможности компьютерного конструирования материалов с высокопористой и каркасной структурой на основе метода подвижных клеточных автоматов

© С.Г. Псахье, Д.Д. Моисеенко, А.И. Дмитриев, Е.В. Шилько,
С.Ю. Коростелев, А.Ю. Смолин, Е.Е. Дерюгин, С.Н. Кульков

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 3 июля 1997 г.

Методом подвижных клеточных автоматов моделировался образец ZrO_2 -керамики с каркасной структурой в условия одноосного сжатия. Исследовались прочность и характер разрушения исходной структуры и ее модификаций. Особое место отводилось изучению влияния особенностей каркасной структуры на формирование и подавление внутренних макроконцентраторов напряжений. Показана возможность применения метода подвижных клеточных автоматов для компьютерного конструирования каркасных материалов со сложной структурой путем направленного воздействия на формирование и развитие макроконцентраторов напряжений.

Изучение механических свойств материалов с каркасной структурой представляет большой интерес не только для классических задач биомеханики [1,2], но и для других областей механики, например при нахождении оптимального соотношения вес/прочность (транспортные материалы) или поглощаемая энергия/живучесть (звукоизоляторы, виброкомпенсаторы).

Экспериментальное исследование как прочности, так и других свойств каркасных материалов требует не только значительных усилий и материальных затрат, но часто встречает принципиальные трудности, связанные с изучением динамики процесса разрушения по локальным областям каркаса. Невозможность детального исследования процесса приводит к искажению и даже потере информации о влиянии топологических особенностей каркасной структуры на ее эксплуатационные характеристики.

Обычно для теоретического изучения этого вопроса используются сеточные методы механики сплошной среды, однако в настоящее время начинают использоваться дискретные подходы [3]. В частности, одним из наиболее прогрессивных дискретных методов является метод подвижных клеточных автоматов (английская аббревиатура — МСА) [3–7].

В рамках данного метода моделируемый материал представляется как ансамбль элементов, взаимодействующих между собой по определенным правилам. Благодаря мобильности отдельных элементов, такой подход позволяет моделировать различные процессы, имеющие место в реальном, гетерогенном материале, включая: эффекты проникания, массоперенос, эффекты фрагментации, формирование повреждений, развитие трещин и т.д. Путем задания условий на границах можно имитировать различные режимы механического нагружения (сжатие, растяжение, сдвиговая деформация и др.).

В настоящей работе данный метод применяется к решению задач, связанных с изучением отклика (вплоть до разрушения) каркасных структур. Моделировался образец ZrO_2 -керамики с каркасной структурой в условия одноосного сжатия.

Для генерации каркасной структуры был разработан специальный алгоритм построения произвольных каркасных структур с заранее заданными статистическими характеристиками его топологии. Моделируемый в настоящей работе образец представлял собой высокопористую ($\sim 46\%$ пористости) структуру (рис. 1, а). Размеры образца составляли 1.86×2.05 см. Функция отклика автомата для подобных задач определяется механическими свойствами моделируемого материала [3,4]. Одним из таких параметров является модуль Юнга, который в настоящей работе (для элементов каркаса) соответствовал модулю Юнга спеченной керамики (образцы спекались из нанокристаллических порошков ZrO_2) и был равен $2 \cdot 10^{12}$ дин/см². Нагружение образца имитировалось заданием элементам верхнего слоя (рис. 1, а) постоянных скоростей 10 см/с.

Рассчитанная диаграмма нагружения показана на рис. 2. Видно, что прочность данной структуры составила $8 \cdot 10^8$ дин/см². Отметим, что для сплошного образца тех же размеров с теми же параметрами элементов расчеты показали прочность $1.4 \cdot 10^{10}$ дин/см². Полученные результаты достаточно хорошо согласуются с результатами проведенных экспериментов: прочность беспористой керамики $\sim 1.3 \cdot 10^{10}$ и $\sim 6 \cdot 10^8$ дин/см²

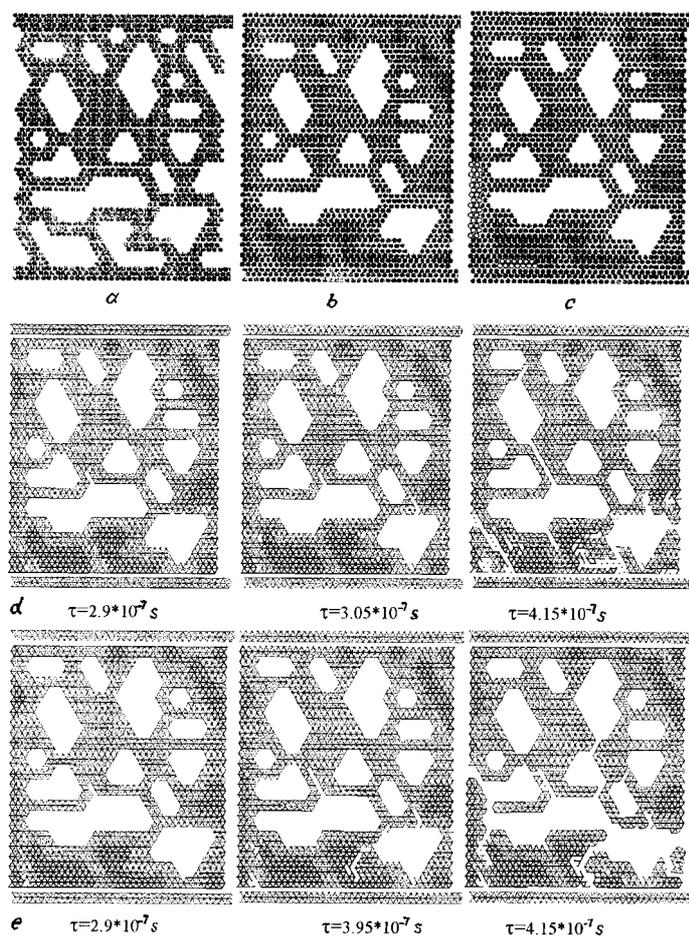


Рис. 1. *a* — исходная структура; *b* — каркас с наполнителем в открытых порах; *c* — каркас с включениями; *d* — динамика разрушений образца с наполнителем; *e* — динамика разрушений образца с наполнителем и корундовыми пластинами.

при пористости 50%. Экстраполяция показывает, что количественное расхождение между расчетными и экспериментальными результатами не превосходит 15–20%.

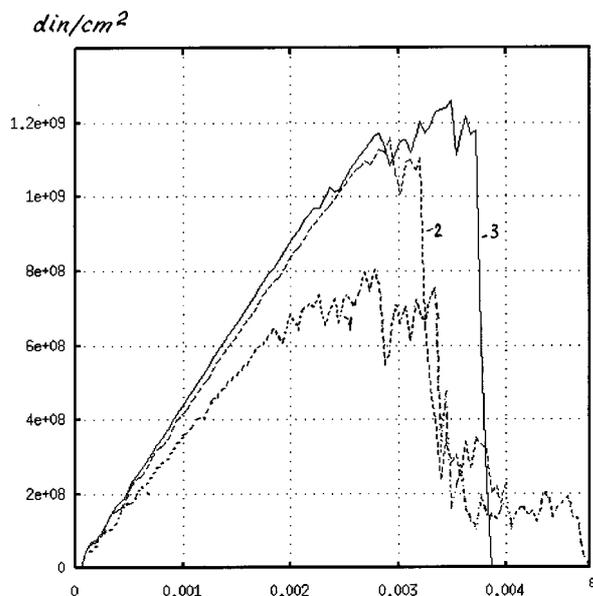


Рис. 2. Диаграммы нагружения (нагрузка — относительное удлинение): 1 — исходная структура; 2 — структура с поверхностным заполнением; 3 — структура с упрочняющими включениями.

На практике повышение прочностных характеристик каркасных материалов достигается, как правило, введением специального наполнителя в открытые (выходящие на поверхность) поры.

Используя преимущества МСА, в настоящей работе моделировалось разрушение образца с наполнителем в поверхностных порах. В качестве модельного наполнителя "использовалось" оргстекло с модулем Юнга $5 \cdot 10^{10} \text{ din/cm}^2$.

Из рассчитанной диаграммы нагружения (рис. 2) видно, что прочность образца возросла до $11,5 \cdot 10^8 \text{ din/cm}^2$ (почти в 1,5 раза). Характерно, что теоретическая прочность оргстекла с используемыми в расчетах параметрами в 1,5 раза ниже прочности керамики, а относительный объем наполнителя был равен 21,8% от объема материала каркаса. Это соответствует существующим представлениям о влиянии

приповерхностных слоев на прочностные характеристики материалов с каркасной структурой.

Динамика развития разрушения для образца с поверхностным заполнением показана на рис. 1, *d*. Видно, что сложная топология структуры образца привела к образованию макроконцентратора напряжений. Это привело к формированию магистральной трещины (рис. 1, *d*, $\tau = 4.15 \cdot 10^{-7}$) в левом нижнем углу образца и, как результат, к потере его несущей способности. Необходимо отметить, что появление первых повреждений началось значительно раньше. Из рис. 1, *d* ($\tau = 3.05 \cdot 10^{-7}$) видно, что они распределялись сложным образом по образцу, высвобождая и перераспределяя упругую энергию.

Одним из возможных путей повышения прочности при сжатии является локальное изменение свойств рассматриваемой каркасной структуры. Для этого необходимо знание эволюции исходного образца вплоть до разрушения. Так, в настоящей работе было проведено моделирование разрушения образца с каркасной структурой, показанной на рис. 1, *c*, где в местах выхода магистральной трещины на поверхность были размещены два "упрочняющих" корундовых (Al_2O_3) включения. Относительный объем включений составил менее 2%. Результаты расчета показали совершенно другой характер динамики разрушения моделируемой структуры. Так, в частности, из рис. 1, *e* видно, что введение включений привело к следующему:

- 1) изменению картины перераспределения напряжений в процессе нагружения;
- 2) блокированию развития макроконцентратора;
- 3) изменению пространственной картины высвобождения упругой энергии;
- 4) изменению динамики формирования и развития повреждений;
- 5) подавлению процесса развития магистральной трещины.

В итоге, как видно из диаграммы нагружения, показанной на рис. 2, прочность образца возросла до $13 \cdot 10^8 \text{ din/cm}^2$. Отметим, что полное разрушение образца наступило при деформации 0.35%, в то время как для пустого каркаса эта величина была равна 0.28%, а для частично заполненного — 0.29%. Из сравнения диаграмм нагружения видно, что, несмотря на малый процент включений, блокировка концентратора повлекла за собой изменение эффективного модуля Юнга образца в целом.

В настоящей работе показано, что наряду с решением проблемы упрочнения образцов с каркасной структурой путем полного или частичного их заполнения возможен другой способ упрочнения, основанный на выявлении и подавлении формирования и развития макроконцентраторов. Таким образом, на основе использования метода подвижных клеточных автоматов появляется возможность для конструирования изделий и элементов конструкций из материалов с каркасной и высокопористой структурой как путем подбора материала-заполнителя, так и направленным воздействием на формирование макроконцентраторов. Отметим, что проблема формирования макроконцентраторов напряжений в образцах со сложной внутренней структурой является достаточно общей и требует детального рассмотрения в каждом конкретном случае.

Список литературы

- [1] *Rubin P.J., Rakotomanana R.L., Leyvraz P.F., Zysset P.K., Curnier A., Heegaard J.H.* // J. of Biomechanics. 1993. V. 26. P. 725–739.
- [2] *Heegaard J.H., Curnier A.* // Int. J. Num. Meth. Engn. 1993. V. 36. P. 569–593.
- [3] *Псахье С.Г., Хори Я., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Алексеев С.В.* // Изв. вузов. Физика. 1995. № 11. С. 58–69.
- [4] *Псахье С.Г., Смолин А.Ю., Коростелев С.Ю., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Алексеев С.В.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 20. С. 72–76.
- [5] *Псахье С.Г., Шилько Е.В., Дмитриев А.И., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 2. С. 90–93.
- [6] *Псахье С.Г., Шилько Е.В., Дмитриев А.И., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю., Коростелева Е.Н.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 12. С. 69–74.
- [7] *Psakhie S.G., Smolin A.Yu., Shilko E.V., Korostelev S.Yu., Dmitriev A.I., Alekseev S.V.* // Journal of materials science & technology. 1997. V. 13. P. 69–72.