

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Южный федеральный университет»

На правах рукописи



Корниевский Александр Сергеевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ
ПОРИСТЫХ АНИЗОТРОПНЫХ УПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ С
УЧЕТОМ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ И ПОВЕРХНОСТНЫХ
НАПРЯЖЕНИЙ**

Специальность 1.2.2 –
«Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ»

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физ.-мат. наук, профессор
А.В. Наседкин

Ростов-на-Дону - 2023

Оглавление

Введение.....	3
Глава 1. Математические модели и конечно-элементные методы гомогенизации пористых материалов.....	16
1.1. Методы моделирования пористых упругих тел и композитных материалов.....	16
1.2. Высокопористые или пенообразные материалы.....	18
1.3. Моделирование наноразмерных композитов.....	20
1.4. Постановки задач теории упругости с поверхностными и интерфейсными напряжениями для анизотропных неоднородных тел.....	21
1.5. Обобщенная постановка задачи.....	27
1.6. Конечно-элементные аппроксимации.....	28
Глава 2. Методы генерации представительных объемов.....	32
2.1. Моделирование представительного объема со случайным распределением пор.....	32
2.2. Моделирование композитов со связностью 3-3.....	34
2.3. Моделирование базовых регулярных решеток.....	38
2.4. Моделирование нерегулярных решеток.....	44
2.5. Моделирование ячеек различной конфигурации с фиксированной пористостью....	48
2.6. Конечно-элементное разбиение и сходимости модели.....	52
2.7. Моделирование мембранных элементов.....	54
Глава 3. Вычислительные эксперименты по определению эффективных модулей пористых анизотропных упругих материалов с интерфейсными напряжениями.....	60
3.1. Численные эксперименты для композитов кубической формы и различной пористости с учетом поверхностных напряжений.....	60
3.2. Численные эксперименты для базовой ячейки при различной пористости. Сравнение с аналитической моделью Гибсона-Эшби.....	69
3.3. Численные эксперименты для регулярных и нерегулярных решеток.....	70
3.4. Численные эксперименты для ячеек с различной геометрической конфигурацией....	78
3.5. Численные эксперименты для наноразмерных базовых ячеек.....	84
3.6. Численные эксперименты для наноразмерных ячеек различной конфигурации.....	89
Заключение.....	94
Список литературы.....	97
Приложение.....	106

Введение

Актуальность темы. Популярность высокопористых материалов в последнее время очень сильно возросла. Это напрямую связано с тем, что они широко используются в различных областях нашей жизни. Например, применение пенообразных материалов можно встретить как в простых упаковочных материалах, так и в сложных топливных элементах солнечных панелей. Как правило, они имеют пенообразную, ячеистую, клеточную или сотовую структуру, благодаря этому такие материалы обладают рядом преимуществ, таких как относительно высокая жесткость при малой плотности или низкая теплопроводность.

Раньше, как правило, использовались естественные пористые материалы или искусственные материалы со случайным распределением пор. В таких структурах размеры пор могут очень сильно отличаться друг от друга, что впоследствии могут приводить к возникновению анизотропных свойств, даже если материал каркаса изначально являлся изотропным. Кроме того, как правило, основные физические характеристики пористого композита будут зависеть только от общей пористости всего материала. Сейчас, благодаря современным методам производства, можно создавать высокопористые материалы, обладающие правильными структурами. В таких упорядоченных структурах основные физические характеристики материала зависят не только от пористости, но и от геометрической конфигурации самой структуры. Более того, сейчас наблюдается значительный рост интереса в изучении наноразмерных пористых материалов. Это связано с развитием нанотехнологий и современными практическими применениями наноустройств и наноструктурированных материалов, так и с возникновением у материалов на наноуровне некоторых аномальных физических свойств, которые невозможно описать в рамках обычной механики.

Таким образом, **актуальность данной работы** определяется перспективностью разработки численных методов, математических моделей и программных средств для компьютерного исследования высокопористых структур как на макро, так и на наноуровне. Важной задачей является создание предсказательных моделей не только для определения эффективных механических свойств, но и для поиска оптимальной геометрической структуры пористого материала.

Кроме того, актуальность темы подтверждается наличием большого числа исследований высокопористых материалов, проведенных другими авторами. В этих работах было представлено множество результатов, полученных теоретическими и

экспериментальными методами. Также другими учеными проводилось и конечно-элементное моделирование высокопористых материалов. Однако, в этих работах, как правило, моделировались только ячейки стандартного вида или регулярные решетки. В данной диссертационной работе рассматривались как ячейки с различной геометрической структурой, так и регулярные и нерегулярные решетки. Все полученные модели были также расширены до наномасштабных. Для наноструктурированных упругих материалов со случайной структурой пористости были также рассмотрены задачи гомогенизации с учетом поверхностных напряжений для некоторых классов анизотропных материалов.

Целью данной работы является разработка математических и компьютерных моделей для решения задач гомогенизации композитов и численное исследование эффективных механических свойств пористых и высокопористых материалов как на макро, так и на наноуровне, включая исследование механических свойств таких материалов при различных конфигурациях геометрической структуры.

Для реализации указанной цели были решены следующие **задачи**:

в области математического моделирования –

- постановка задач гомогенизации для каркаса пористого анизотропного упругого материала и для композита, составленного из двух фаз: анизотропного упругого материала и пустот, моделируемых гипотетическим упругим материалом с малыми упругими жесткостями;
- постановка задач гомогенизации для наноструктурированных пористых материалов гексагонального класса сингонии при учете размерного эффекта по теории поверхностных или интерфейсных напряжений Гуртина-Мурдоха в представительных объемах гексагональной структуры;

в области численных методов –

- разработка конечно-элементных моделей кубических представительных объемов для пористых композитов с возможностями учета поверхностных или интерфейсных напряжений;
- разработка конечно-элементных моделей регулярных и нерегулярных решеток, основанных на ячейках Гибсона-Эшби, для материалов с различной пористостью;

в области разработки программных комплексов –

- разработка комплексов компьютерных программ для построения кубических конечно-элементных представительных объемов двухфазных композитов с возможностями размещения интерфейсных элементов и конечно-элементных представительных объемов для структур, состоящих из ячеек Гибсона-Эшби;
- разработка компьютерных программ для расчета полного набора эффективных модулей упругих пористых материалов рассматриваемых классов с возможностями учета поверхностных или интерфейсных напряжений.

Научная новизна данной работы состоит в следующем.

1. Разработаны модели гомогенизации пористых анизотропных упругих композитов с возможностями учета поверхностных или интерфейсных напряжений по методу эффективных модулей, поддерживающие энергетические соотношения Хилла.
2. Разработаны конечно-элементные модели нанокompозитов, учитывающие поверхностные напряжения Гуртина-Мурдоха.
3. Разработаны специальные алгоритмы для размещения интерфейсных конечных элементов на гранях контакта элементов различных фаз композита.
4. Разработаны алгоритмы для расчета полного набора эффективных модулей жесткости для композитов с произвольными типами как физической, так и геометрической анизотропии.
5. Разработаны конечно-элементные модели композитов различной геометрической конфигурации, основанные на ячейке Гибсона-Эшби.
6. Разработаны алгоритмы для генерации регулярных и нерегулярных решеток, составленных из ячеек Гибсона-Эшби.
7. Проведены численные эксперименты и последующий анализ результатов решения задач гомогенизации пористых композитов с поверхностями напряжениями и высокопористых ячеистых композитов.

Основные результаты и положения, выносимые на защиту

в области математического моделирования:

- модели двухфазных пористых композитов и трехфазных композитов, состоящих из упругой матрицы, пор и интерфейсных границ со своими поверхностными свойствами;
- математическое обоснование методов гомогенизации пористых композитов с учетом поверхностных или интерфейсных напряжений;

в области численных методов:

- модели и алгоритмы построения представительных объемов, учитывающие внутреннюю структуру пористых композитов с мембранными элементами на границах между матрицей материала и пора́ми;
- модели и алгоритмы построения представительных объемов высокопористых композитов, составленных из регулярных и нерегулярных ячеек Гибсона-Эшби;
- модификации моделей и алгоритмов построения представительных объемов композитов, составленных из ячеек Гибсона-Эшби при средней и малой пористости;
- конечно-элементные методы и алгоритмы, реализующие технологию вычисления эффективных механических свойств;

в области программного обеспечения:

- специализированные программы, разработанные для APDL ANSYS и предназначенные для вычисления в ANSYS эффективных модулей пористых упругих композитов, в том числе с учетом наличия поверхностных или интерфейсных напряжений;

общие результаты:

- результаты компьютерных экспериментов, анализ эффективных модулей жесткости пористых композитов.

Теоретическая и практическая значимость. Научная значимость заявляемых результатов связана с комплексным развитием методов моделирования, конечно-элементных технологий и программного инструментария для определения эффективных свойств пористых и высокопористых композитов с усложненными механическими свойствами, такими как поверхностные напряжения и/или анизотропия. Разработанные программы и инструменты позволяют прогнозировать механические свойства пористых композитов с различной геометрией и, следовательно, упростить и удешевить процесс создания материалов с наиболее подходящей структурой для определенных целей.

На разных этапах выполнения настоящее диссертационное исследование было поддержано следующими грантами:

- грант РФФИ №15–19–10008 «Методы микроструктурного нелинейного анализа, волновой динамики и механики композитов в исследовании и дизайне современных метаматериалов и элементов конструкций на их основе», 2015-2019, рук. М.А. Сумбатьян;
- грант РФФИ № 16–01–00785 «Размерное моделирование пьезоэлектрических композитов с граничными и межфазными поверхностными эффектами», 2016-2018, рук. А.В. Наседкин;
- грант проектной части госзадания Минобрнауки 9.1001.2017/ПЧ «Моделирование микро- и наноструктурированных композитных материалов со связанностью физико-

механических полей: теория, алгоритмы и программный инструментарий», 2017-2019, рук. А.В. Наседкин;

– грант Правительства РФ № 075–15-2019-1928 «Модели, алгоритмы и программные средства для многомасштабного анализа новых материалов и физически активных сред», 2021, рук., ведущий ученый Ч.-Ч. Бай;

– грант РФФИ (Аспиранты) № 20–31–90057 «Моделирование и определение эффективных свойств пористых анизотропных упругих материалов с учетом внутренней структуры и поверхностных напряжений», 2020-2022, рук. А.В. Наседкин; осн. исполн., аспирант А.С. Корниевский;

– грант РФФИ № 22–11–00302 «Моделирование гидроакустических пьезопреобразователей и пьезогенераторов «зеленой энергии» с активными элементами, выполненными из композитной пьезокерамики», 2023, рук. А.В. Наседкин.

Методы исследования.

В работе рассматривались обычные пористые материалы, высокопористые материалы и наноразмерные пористые материалы.

Как известно, наноразмерные материалы обладают некоторыми свойствами, которые не проявляются в макромасштабах. Существует множество теорий, объясняющих такой эффект. Наиболее популярной является модель Гуртина-Мурдоха (Gurtin – Murdoch), согласно которой на границы наноразмерного материала накладываются дополнительные упругие плоские мембраны, обладающие поверхностным напряжением.

В связи с этим, при моделировании пористых композиционных материалов на наноразмерном уровне использовались следующие связанные между собой подходы:

- введение в модели соотношений, отражающих эффекты существования поверхностных напряжений в рамках теории Гуртина-Мурдоха для анизотропных упругих сред;
- добавление интерфейсных межфазных границ в рамках теории Гуртина-Мурдоха;
- дополнительные вычисления при решении задач гомогенизации напряжений на интерфейсных границах и их средних значений.

Для пористых композитных материалов развивались методы гомогенизации смесевых упругих композитов, состоящих из матрицы основного материала; из пор, которые рассматриваются как частный случай включений с пренебрежимо малыми жесткостями; и из интерфейсных слоев с поверхностными материальными модулями. При

исследованиях задач на микро- и наноуровнях использовались методы гомогенизации для неоднородных задач с краевыми условиями, принятыми в методе эффективных модулей, а также с интерфейсными условиями для поверхностных эффектов на границах раздела фаз.

Таким образом, в работе использовались методы осреднения механики композитов, основанные на моделях для неоднородных анизотропных упругих сред с поверхностными эффектами, методы эффективных модулей и многомасштабного моделирования.

Среди множества моделей, описывающих эффективные свойства пенообразных материалов, была выбрана наиболее популярная в настоящий момент аналитическая модель Гибсона-Эшби, основанная на одноименной ячейке. Однако, в данной работе исследовались как обычные пористые материалы, так и высокопористые материалы различной пористости и геометрической структуры, в связи с чем рассматривались также видоизмененные ячейки Гибсона-Эшби. Из-за широкой вариативности структуры ячеек и разнообразия поставленных задач для нахождения эффективных свойств использовался метод конечных элементов. Данный подход позволяет решать задачи гомогенизации не только при различной геометрии, но и при различных материальных свойствах и количестве фаз, рассматриваемого композита.

Разработан набор программ на языке APDL ANSYS, позволяющий строить ячейки Гибсона-Эшби различной конфигурации и произвольные решетки, составленные из таких ячеек. Написаны алгоритмы, сохраняющие связность, строящихся нерегулярных решеток. Кроме того, модель была построена таким образом, что можно автоматически изменять масштаб конечно-элементного разбиения. Это позволило при проведении вычислительных экспериментов сначала исследовать сходимость конечно-элементной модели, выбрать оптимальный размер разбиения и затем выполнять дальнейшие численные эксперименты. В качестве конечного элемента был выбран стандартный гексаэдральный элемент SOLID185 из библиотеки ANSYS, который имеет восемь узлов с тремя степенями свободы перемещений в каждом узле.

Для конечно-элементного исследования пористых наноразмерных композитов разработаны программы, которые автоматически накладывают мембранные (пластинчатые) элементы на поверхности представительного объема. В качестве конечного элемента был выбран четырехузловой элемент SHELL181 с шестью степенями свободы перемещений и углов поворота в каждом узле с опцией мембранных напряжений, при которой степени свободы углов поворота отсутствуют.

После построения необходимой модели и разбиения ее конечными элементами численно решались шесть задач с заданными перемещениями (три задачи о растяжении и три сдвиговых задачи), которые в совокупности позволили найти все компоненты эффективной матрицы жесткостей для композита с произвольным классом анизотропии.

Достоверность полученных результатов основана на использовании классических методов гомогенизации композитов в совокупности с методом конечных-элементов. Моделирование поверхностных эффектов было основано на теории Гуртина-Мурдоха, а в качестве высокопористой структуры была взята модель, базирующаяся на ячейке Гибсона-Эшби. Оба подхода являются достаточно популярными, неоднократно применялись при исследовании композитных структур и подтверждались экспериментально. Кроме того, все предложенные в данной работе модели сравнивались с известными частными случаями.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, списка литературы и приложения. Объем работы составляет 120 страниц, включая 59 рисунков и 3 таблицы. Список литературы содержит 110 наименований.

Публикации.

По теме диссертационной работы опубликована 31 работа:

1. Kornievsky, A. Numerical Investigation of Mechanical Properties of Foams Modeled by Regular Gibson–Ashby Lattices with Different Internal Structures / Kornievsky A., Nasedkin A. // *Materialia*. – 2022. – Vol. 26. – P. 101563. – DOI : 10.1016/j.mtla.2022.101563.
2. Корниевский, А.С. Сравнение моделей пен, составленных из регулярных и нерегулярных массивов открытых ячеек Гибсона-Эшби / А. С. Корниевский, А. В. Наседкин // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2021. – №3. – С. 70-83. – DOI: 10.15593/perm.mech/2021.3.07.
3. Наседкин, А.В. Конечно-элементное моделирование эффективных свойств анизотропных упругих материалов со случайной наноразмерной пористостью / А. В. Наседкин, А. С. Корниевский // *Вычислительная механика сплошных сред*. – 2017. – Т. 10, № 4. – С. 375-387. – DOI: 10.7242/1999-6691/2017.10.4.29.
4. Kornievsky, A. Finite element study of effective moduli of nanoporous materials composed of regular Gibson-Ashby cells with surface stresses / Kornievsky A., Nasedkin A. // *Physics and*

- Mechanics of New Materials and Their Applications. Springer Proceedings in Materials. 2023. – Vol. 20. – Ch. 22. – P. 276-289. – DOI: 10.1007/978-3-031-21572-8_22.
5. Kornievsky, A. S. Finite element analysis of foam models based on regular and irregular arrays of cubic open cells having uniform or normal distributions / A. S. Kornievsky, A. V. Nasedkin // *Advanced Materials Modelling for Mechanical, Medical and Biological Applications. Advanced Structured Materials*. 2022. – Vol. 155. – Ch. 15. – P. 251-269. – DOI: 10.1007/978-3-030-81705-3_15.
 6. Nasedkin, A.V. Numerical investigation of effective moduli of porous elastic material with surface stresses for various structures of porous cells / A. V. Nasedkin, A. S. Kornievsky // *Wave Dynamics, Mechanics and Physics of Microstructured Metamaterials. Advanced Structured Materials*. 2019. – Vol. 109. – Ch. 15. – P. 217-228. – DOI: 10.1007/978-3-030-17470-5_15.
 7. Nasedkin, A.V. Finite element modeling and computer design of anisotropic elastic porous composites with surface stresses / A. V. Nasedkin, A. S. Kornievsky // *Wave Dynamics and Composite Mechanics for Microstructured Materials and Metamaterials. Advanced Structured Materials*. 2017. – Vol. 59. – Ch. 6. – P. 107-122. – DOI: 10.1007/978-981-10-3797-9_6.
 8. Nasedkin, A.V. Finite element homogenization of elastic materials with open porosity at different scale levels / A. V. Nasedkin, A. S. Kornievsky // *AIP Conference Proceedings*. – 2018. – Vol. 2046. – P. 020064. – DOI: 10.1063/1.5081584.
 9. Nasedkin, A.V. Modeling of nanostructured porous thermoelastic composites with surface effects / A. V. Nasedkin, A. A. Nasedkina, A. S. Kornievsky // *AIP Conference Proceedings*. – 2017. – Vol. 1798. – P. 020110. – DOI: 10.1063/1.4972702.
 10. Nasedkin, A.V. Finite element modeling of effective properties of nanoporous thermoelastic composites with surface effects / A. V. Nasedkin, A. A. Nasedkina, A. S. Kornievsky // *Proceedings of the 7th International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, COUPLED PROBLEMS 2017*. – 2017. – P. 1140-1151. – Режим доступа: <http://congress.cimne.com/coupled2017/frontal/Doc/Ebook2017.pdf>. (дата обращения 10.10.2023)
 11. Корниевский, А.С. Численное моделирование пенообразных материалов при различной конфигурации ячеек Гибсона–Эшби / А. С. Корниевский // *Современные информационные технологии: тенденции и перспективы развития: материалы XXVIII научной конференции, (Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 13 – 15 мая*

- 2021 г.). – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2021. – С. 219-222.
12. Корниевский, А.С. Численное исследование эффективных свойств анизотропных упругих композитов со случайной и с открытой пористостью при учете поверхностных напряжений / А. С. Корниевский // Современные проблемы механики сплошной среды: труды XIX Международной конференции (Ростов-на-Дону, 15–18 октября 2018 г.): в 2 т. Т. 2. – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2018. – С. 138-142.
 13. Корниевский, А.С. Конечно-элементная гомогенизация нанопористого упругого материала гексагонального класса симметрии с учетом поверхностных эффектов / А. С. Корниевский, А. В. Наседкин // Инновационные технологии в науке и образовании (ИТНО-2018): материалы VI Международной научно-практической конференции (с. Дивноморское, 5-9 сентября 2018 г.). – Ростов-на-Дону: ДГТУ-Принт, 2018. – С. 290-295.
 14. Корниевский, А.С. Конечно-элементный анализ наноструктурированных пористых термоупругих композитов с поверхностными эффектами / Корниевский А. С., Наседкин А. В., Наседкина А. А. // Современные проблемы механики сплошной среды: труды XVIII Международной конференции (Ростов-на-Дону, 7–10 ноября 2016 г.) : в 2 т. Т. 2. – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2016. – С. 25-29.
 15. Корниевский, А.С. Конечно-элементное моделирование высокопористых наноразмерных материалов, основанных на ячейке Гибсона-Эшби, с учетом поверхностных напряжений / А. С. Корниевский // Математическое моделирование и биомеханика в современном университете: тезисы докладов XVI Всероссийской школы, (пос. Дивноморское, 26 мая — 31 мая 2022 г.). – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2022. – С. 51.
 16. Корниевский, А.С. Конечно-элементное моделирование высокопористых материалов, составленных из регулярных ячеек Гибсона – Эшби различной конфигурации / А. С. Корниевский // XVIII Ежегодная молодежная научная конференция «Наука Юга России: достижения и перспективы», 18–29 апреля 2022 г.: тезисы докладов. – Ростов-на-Дону: ЮНЦ РАН, 2022 – С. 241.
 17. Компьютерный анализ эффективных свойств пенообразных пьезоэлектрических материалов / А. В. Наседкин, А. И. Волков, А. С. Корниевский, Я. В. Толмачева //

- Сборник тезисов XXII Всероссийской конференции по физике сегнетоэлектриков (ВКС-XXII), (Екатеринбург, 25-28 августа 2021 г.). – Екатеринбург: Уральский федеральный университет, 2021. – С. 110.
18. Корниевский, А.С. Конечно-элементное моделирование пен, основанных на ячейках Гибсона — Эшби, с регулярными и нерегулярными решетками / А. С. Корниевский // Математическое моделирование и биомеханика в современном университете: тезисы докладов XV Всероссийской школы, (с. Дивноморское, 26 мая — 31 мая 2021 г.), – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2021. – С. 81.
 19. Kornievsky, A.S. Computer Investigation of Nanoporous Elastic Composites with Various Sizes and Structure of Pores / A. S. Kornievsky, A. V. Nasedkin // 2020 International Conference on “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications” (PHENMA 2020), Kitakyushu, Japan, March 26–29, 2021 : Abstracts & Schedule. – Rostov-on-Don; Taganrog: Southern Federal University Press. – P. 152.
 20. Корниевский, А.С. Конечно-элементный анализ пен, моделируемых регулярными и нерегулярными решетками из ячеек Гибсона-Эшби / Корниевский А. С., Наседкин А. В. // XXII Зимняя школа по механике сплошных сред, 22-26 марта 2021г.: тезисы докладов. – Пермь, 2021. – С. 176.
 21. Корниевский, А.С. Численный анализ высокопористых структур с регулярной и нерегулярной решетками, основанными на ячейках Гибсона – Эшби / А. С. Корниевский // Наука и технологии Юга России: XVII Ежегодная молодежная научная конференция, г. Ростов-на-Дону, 15–30 апреля 2021 г.: тезисы докладов. – Ростов-на-Дону: ЮНЦ РАН, 2021. – С. 269.
 22. Корниевский, А.С. Численное исследование эффективных модулей пористого упругого материала с поверхностными напряжениями в кубической ячейке с различными формами пор / А. С. Корниевский // Математическое моделирование и биомеханика в современном университете: тезисы докладов XIV Всероссийской школы (с. Дивноморское, 27-31 мая 2019 г.). – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2019. – С. 85.
 23. Корниевский, А.С. Численное исследование эффективных свойств анизотропных упругих композитов со случайной и с открытой пористостью при учете поверхностных напряжений / А. С. Корниевский // Современные проблемы механики сплошной среды:

- тезисы докладов XIX Международной конференции, Ростов-на-Дону, 15-18 октября 2018 года. – Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2018. – С. 73.
24. Наседкин, А.В. Анализ эффективных модулей нанопористых упругих материалов на основе безразмерного конечно-элементного моделирования и поверхностных эффектов / А. В. Наседкин, А. С. Корниевский // XII Международная конференция «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций», (Екатеринбург, 21–25 мая 2018 г.): сборник материалов. – Екатеринбург: ИМАШ УрО РАН, 2018. – С. 259.
25. Nasedkin, A.V. Modeling of increased stiffness for anisotropic nanoporous composites based on ANSYS finite element software / A. V. Nasedkin, A. S. Kornievsky // XXVII International conference “Mathematical and computer simulation in mechanics of solids and structures - MCM 2017”. Fundamentals of static and dynamic fracture, September 25-27, 2017, Saint Petersburg, Russia: book of abstracts. – Saint Petersburg: VVM publ., [2017]. – P. 143-144.
26. Nasedkin, A.V. Modeling of Nanostructured Porous Piezoceramics with Membrane and Volumetric Elements Taking into Account Surface Effects / A. V. Nasedkin, A. A. Nasedkina, A. S. Kornievsky // 2017 International Conference on “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications” (PHENMA 2017), Jabalpur, India, October 14-16, 2017: Abstracts & Schedule. – Jabalpur, India: PDPM Indian Institute of Information Technology, Design and Manufacturing, Jabalpur, India. P. 161-162.
27. Корниевский, А.С. Компьютерное моделирование эффективных упругих свойств бериллия со случайной наноразмерной пористостью с учетом поверхностных напряжений Гуртина-Мурдоха / А. С. Корниевский // Математическое моделирование и биомеханика в современном университете: тезисы докладов XII Всероссийской школы-семинара, (пос. Дивноморское, 29 мая – 3 июня 2017 г.). – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2017. – С. 74.
28. Корниевский, А.С. Модели гомогенизации смесевых композитов с пограничными свойствами в межфазных зонах / Корниевский А. С., Наседкин А. В., Наседкина А. А. // Порядковый анализ и смежные вопросы математического моделирования: тезисы докладов XIV Международной научной конференции (с. Цей, 3-8 июля 2017 г.). – Владикавказ: ЮМИ ВНЦ РАН, 2017. – С. 154-155. – Режим доступа: http://smath.ru/upload/iblock/034/sborka_tez_tcey_30062017.pdf. (дата обращения 10.10.2023)

29. Корниевский, А.С. Конечно-элементный анализ наноструктурированных пористых термоупругих композитов с поверхностными эффектами / Корниевский А. С., Наседкин А. В., Наседкина А. А. // Современные проблемы механики сплошной среды: тезисы докладов XVIII Международной конференции, Ростов-на-Дону, 7-10 ноября 2016 года. – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2016. – С. 103.
30. Корниевский, А.С. Моделирование наноразмерного пористого упругого тела с учетом поверхностных напряжений в пакете ANSYS / А. С. Корниевский // XII Ежегодная научная конференция студентов и аспирантов базовых кафедр Южного научного центра РАН, г. Ростов-на-Дону, 15-28 апреля 2016 г.: тезисы докладов. – Ростов-на-Дону: ЮНЦ РАН, 2016. – С. 291-292.
31. Корниевский, А.С. Моделирование в ANSYS пористых композитов с учетом поверхностных напряжений / А. С. Корниевский, А. В. Наседкин // Мехмат: студенческая наука – 2015: в 2 ч. Ч.2. – Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2015. – С. 51-53.

Представленный список содержит 3 статьи [1-3] в журналах, индексируемых в РИНЦ, Web of Science или в Scopus, 7 статей [4-10] в прочих изданиях, индексируемых в Web of Science или в Scopus, 4 статьи [11-14] в сборниках трудов конференций и 17 тезисов докладов.

В данном списке приведены библиографические данные о 5 статьях [2, 3, 4–7] опубликованных в рецензируемых научных изданиях, включенных в перечень рецензируемых научных изданий ЮФУ, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, соответствующих научной специальности 1.2.2 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (физико-математические науки).

В опубликованных работах совместно с научным руководителем и другими соавторами осуществлены постановки задач и разработаны общие математические подходы, все соавторы участвовали вместе в обсуждении общих выводов и в подготовке публикаций. Автор диссертационной работы осуществлял алгоритмическую и компьютерную части исследований, разрабатывал методы и алгоритмы конструирования представительных объемов, специализированные программные средства и проводил анализ результатов вычислительных экспериментов.

Апробация работы. Результаты по теме научно-квалификационной работы были представлены на следующих научных мероприятиях:

1. XVI Всероссийская школа «Математическое моделирование и биомеханика в современном университете», с. Дивноморское, 26 мая – 31 мая 2022 г.
2. XVIII Ежегодная молодежная научная конференция «Наука Юга России: достижения и перспективы», г. Ростов-на-Дону, 18 – 29 апреля 2022 г.
3. XXVIII научная конференция «Современные информационные технологии: тенденции и перспективы развития» (СИТО 2021), г. Ростов-на-Дону, 13 – 15 мая 2021 г.
4. XV Всероссийская школа «Математическое моделирование и биомеханика в современном университете», с. Дивноморское, 26 мая – 31 мая 2021 г.
5. 2020 International Conference on “Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications” (PHENMA 2020), 26-29 March, 2021, Kitakyushu, Japan.
6. XXII Зимняя школа по механике сплошных сред, г. Пермь, 22 – 26 марта 2021г.
7. XVII Ежегодная молодежная научная конференция «Наука и технологии Юга России», Ростов-на-Дону, 15 – 30 апреля 2021 г.
8. XIV Всероссийская школа «Математическое моделирование и биомеханика в современном университете», с. Дивноморское, 27 - 31 мая 2019 г.
9. XIX Международная конференция «Современные проблемы механики сплошной среды», г. Ростов-на-Дону, 15-18 окт. 2018 г.
10. XII Международная конференция «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций», г. Екатеринбург, 21–25 мая 2018 г.
11. XXVII International Conference «Mathematical and Computer Simulation in Mechanics of Solids and Structures» (MCM 2017), Fundamentals of static and dynamic fracture, 25 – 27 September, 2017, St. Petersburg, Russia.
12. XII Всероссийская Школа-семинар «Математическое моделирование и биомеханика в современном университете», пос. Дивноморское, 29 мая - 3 июня 2017.
13. XVIII Международная конференция «Современные проблемы механики сплошной среды», г. Ростов-на-Дону, 7-10 ноября 2016 г.
14. XII Ежегодная научная конференция студентов и аспирантов базовых кафедр Южного научного центра РАН, г. Ростов-на-Дону, 15-28 апреля 2016 г.

Глава 1. Математические модели и конечно-элементные методы гомогенизации пористых материалов

1.1. Методы моделирования пористых упругих тел и композитных материалов

На протяжении многих лет человек использует природные материалы для создания различных инструментов. Сперва для этих целей применялись подручные материалы, такие как древесина, камни или кости, большинство из которых являются пористыми. Со временем человек сначала научился производить металлические инструменты, а затем использовать и пластик в своих целях. Искусственно полученные материалы стали эффективнее и надежнее. Очевидно, что с увеличением пористости, уменьшается жесткость и прочность материалов. Поэтому, на первый взгляд может показаться, что использование пористых материалов осталось в прошлом. Но это далеко не так, сейчас существует множество технологий, специально формирующих пустоты в металлических сплавах. Кроме того, развитие производства пластиков совместно с технологиями 3D-печати позволяют создавать материалы не только с заранее известной пористостью, но и с заранее заданной структурой. Пористые материалы обладают удачным сочетанием механических и физических характеристик. Например, они могут иметь относительно высокую жесткость в сочетании с низкой плотностью и низкой теплопроводностью. Также они обладают высокими звукоизоляционными свойствами и способны поглощать вибрацию или удары. Благодаря всем этим качествам, сегодня пористые материалы окружают нас повсюду: от простых упаковочных или изоляционных материалов, до сложных конструктивных элементов в аэрокосмической отрасли.

Что же такое пористые материалы? Пористым материалом называют сплошное твердое вещество, которое внутри содержит пустоты (поры). Под пористостью понимают отношение объема пор к общему объему рассматриваемого объекта. Обычно поры классифицируют на два типа: открытые и закрытые. Открытые поры соединены между собой и с внешней частью материала. Закрытые поры изолированы от внешней границы и других пор. Для композитов с закрытой и открытой пористостью можно также использовать терминологию Р. Ньюмена, принятую для электроупругих (пьезоэлектрических) композитов: 3-0 (закрытая пористость) и 3-3 (открытая пористость) связности.

Физические и механические характеристики пористых материалов зависят от следующих свойств: природы самого материала, пористости, размеров и геометрии пор. Например, модуль Юнга – основная характеристика жесткости пористого материала может быть определен, как функция от пористости, структуры распределения пор и природы

исходного материала. Для вычисления различных характеристик было проведено множество экспериментальных работ [9, 11, 12, 22–24], на основе которых получен целый ряд эмпирических формул. Основная проблема таких моделей заключается в том, что они, как правило, применимы только для материалов, обладающими определенным узким набором рабочих свойств.

Наряду с моделями, полученными экспериментально, были предложены и аналитические модели. Например, G. Lu и др. [52] была получена формула для нахождения модуля Юнга для материалов с низкой пористостью:

$$E = E_0(1 - 2\phi)(1 + 4\phi^2), \quad (1.1.1)$$

Авторы отмечают, что погрешность результатов при $\phi = 0,2$ достигает 2%, при $\phi = 0,3$ – около 12% и значительно растет при дальнейшем увеличении пористости. Также была получена аналитическая формула Гибсона-Эшби [18] для нахождения модуля Юнга высокопористых материалов или так называемых пен. Подробнее данная модель будет описана в следующем разделе. Для открытых пор она имеет следующий вид:

$$E = E_0(1 - \phi)^2, \quad (1.1.2)$$

В обеих формулах E – модуль Юнга пористого материала, E_0 – модуль Юнга сплошного материала, ϕ – пористость. Основным минусом данных формул является то, что они применимы для ограниченного типа материалов и структуры пористости.

Среди большого числа разделов механики деформируемых сред наиболее часто применяется, по-видимому, линейная теория упругости. Такую популярность можно объяснить тем, что в рамках этой теории был разработан широкий набор апробированных методов для описания поведения широкого класса материалов при малых деформациях. Поэтому и в теории композитов в большей степени используются модели, основанные на решении статических задач линейной теории упругости. Конечно, существуют и другие теоретические модели, основанные на более сложных подходах. Но из-за того, что они имеют более ограниченные применения и являются математически более сложными, они не получили такой популярности.

В рамках модели линейной теории упругости пористый материал может рассматриваться, как композит, состоящий из двух фаз. Матрицей такого композита является исходный упругий материал, а включениями – поры. Задача гомогенизации состоит в том, чтобы, зная материальные модули и геометрические характеристики фаз композита, определить эффективную матрицу жесткостей эквивалентной однородной среды. Зная эффективную матрицу жесткостей, для не сложно получить эффективные

характеристики упругого материала, такие как модуль Юнга, модули сдвига и коэффициенты Пуассона. В качестве критерия эквивалентности принимается равенство энергии композита и энергии однородной среды в представительном объеме при некоторых одинаковых внешних воздействиях. Данный подход хорошо известен и подробно описан в [53, 54].

С усложнением структуры пористости увеличивается и сложность задач по определению эффективных модулей в представительном объеме. Поэтому для решения таких задач были предложены методы расчета эффективных упругих модулей пористых композиционных материалов с использованием конечно-элементных технологий [26, 27, 29 - 32]. Основным преимуществом метода конечных элементов является то, что он позволяет моделировать пористые материалы произвольной структуры. В связи с этим, и поскольку важной частью настоящего исследования является изучение влияния геометрии пор на эффективные свойства материала, в работе широко используется метод конечных элементов.

1.2. Высокопористые или пенообразные материалы

В последнее время большой интерес проявляется к изучению высокопористых или пенообразных материалов. Помимо естественных материалов, как например кость или пробковая древесина, человек теперь использует различные вспененные полимеры, керамику и даже металлы с высоким содержанием пор. Такие материалы все чаще используются из-за сочетания низкой теплопроводности и достаточно высокого модуля упругости при удивительно низкой плотности.

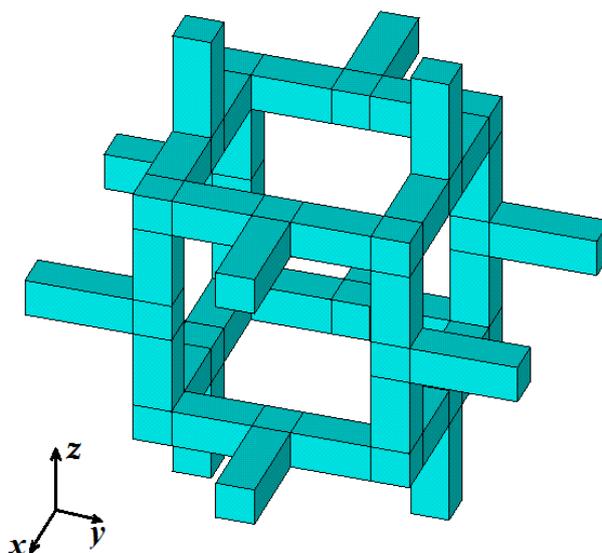


Рис. 1. Ячейка Гибсона-Эшби

Одной из наиболее популярных моделей, неоднократно подтвержденной экспериментально, является модель Гибсона-Эшби [18]. Согласно этой модели, трехмерный пенообразный материал с открытыми порами может быть смоделирован, как массив определенных кубических элементов, названных ячейками Гибсона-Эшби (рис. 1). Такие ячейки располагаются в общей структуре модели так, чтобы они соединялись между собой в своих средних точках. В модели Гибсона-Эшби эффективные модули упругости связаны в первую очередь с жесткостью на изгиб элементов, составляющих ребра ячейки.

Рассматривая задачу об изгибе балки, Гибсон и Эшби получили следующую зависимость эффективного модуля Юнга пенообразного материала от пористости

$$\frac{E}{E_0} = C_1 \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^2, \quad (1.2.1)$$

где E – модуль Юнга пористого материала, E_0 – модуль Юнга сплошного материала, ρ/ρ_s – массовая доля пористого материала, C_1 – константа, значение которой для открытой ячейки принимается равным единице.

Аналогичным образом можно вычислить модуль сдвига G пористого материала

$$\frac{G}{G_s} = C_2 \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^2, \quad (1.2.2)$$

где C_2 – константа, значение которой для открытой ячейки принято равным 0,4.

Коэффициент Пуассона ν является отношением поперечного относительного сжатия к осевому относительному растяжению. Поскольку обе эти величины пропорциональны отклонению при изгибе на длину ячейки, то их соотношение является постоянным. Таким образом, согласно данной модели, коэффициент Пуассона зависит от геометрии ячейки и не зависит от относительной плотности.

Данная модель очень проста в использовании и подтверждается многими экспериментами, хотя у нее есть также и очевидные недостатки. Во-первых, она применима только для высокопористых структур, поскольку модель построена из решения задачи о прогибе балки, то есть длина ребер ячейки должна значительно превышать ее ширину. Во-вторых, данная модель не является универсальной, поскольку она не подходит для ячеек различной геометрической формы. В-третьих, модель Гибсона-Эшби описывает механическое поведение только одной ячейки, то есть ее можно экстраполировать лишь для случая регулярных решеток. Поэтому можно предполагать, что структуры со случайным распределением пор не могут быть описаны в рамках данной модели.

Все перечисленные недостатки частично можно устранить, используя компьютерные модели, основанные на ячейке Гибсона-Эшби. В представленной работе рассматривается задача численного нахождения эффективных модулей пористого композита в форме ячейки Гибсона-Эшби с помощью конечно-элементных (КЭ) технологий. Для верификации КЭ моделей сначала проводятся компьютерные эксперименты со стандартной ячейкой, а затем численные результаты сравниваются с аналитическими, полученными на основе формулы (1.2.1). Далее будут рассмотрены ячейки с различной геометрической конфигурацией и разнообразные решетки, составленные из них. Тем самым будет получена зависимость эффективных модулей не только от пористости материала, но и от его геометрических особенностей.

1.3. Моделирование наноразмерных композитов

Описанные выше модели применимы только для задач, рассматриваемых в макромасштабах. Если характерные блоки пористого материала имеют наноразмеры, то обычные подходы макромеханики требуют изменений, поскольку у наноструктурированных композитов возникают различные аномальные свойства, отличающие их от тел обычных размеров [73, 74].

Объясняется это тем, что атомы на поверхности твердого тела и вблизи нее взаимодействуют с иной локальной средой, чем атомы вдали от поверхности. Аналогичная ситуация возникает на границе раздела двух разнородных сред. Следовательно, энергия, связанная с атомами на поверхности и вблизи нее, обычно отличается от энергии атомов в объеме. Модель, основанную на концепции поверхностной энергии и поверхностного напряжения была впервые введена Гиббсом [75]. В идеализации Гиббса как поверхностная энергия, так и, следовательно, поверхностное напряжение являются величинами в континуальном смысле, то есть они рассматриваются на математической поверхности с нулевой толщиной. Поскольку влияние поверхности на энергию атомов вблизи нее обычно распространяется на несколько атомных слоев, хотя в реальных гетерогенных материалах, вполне вероятно, существует переходная межкомпонентная фаза, эта идеализация широко принята, и поэтому эффектом поверхностного напряжения можно пренебречь в классической механике сплошных сред твердых тел. Однако влиянием поверхностного напряжения нельзя пренебрегать в наноструктурированном материале, характерная длина которого находится в нанометровом диапазоне.

Среди различных моделей поверхностной упругости сейчас наиболее популярной является модель Гуртина-Мурдоха [76]. С физической точки зрения эту модель можно рассматривать как модель упругого тела с приклеенной на ее поверхности эластичной

мембраной. Тензор усилий, действующий в мембране, может быть интерпретирован как тензор поверхностных напряжений. Таким образом, для модели Гуртина-Мурдоха, в дополнение к трехмерным определяющим уравнениям, требуются двумерные определяющие соотношения, в которых тензор поверхностного напряжения зависит от поверхностных деформаций. Упругие мембраны можно разместить и внутри составного тела на границе раздела фаз, что позволяет промоделировать также несовершенные интерфейсные границы со скачками напряжений [77 – 86].

Важным преимуществом модели Гуртина-Мурдоха является ее относительная простота при конечно-элементном моделировании. Для этого мембранные элементы с заданными механическими свойствами достаточно накладывать на границах двух фаз представительного объема. Техника конечно-элементных аппроксимаций для упругих материалов с поверхностными эффектами и примеры расчетов были представлены в [84, 87 – 90] и др.

Модель Гуртина-Мурдоха неоднократно использовалась для моделирования упругих наноразмерных композитов. Так, в [73, 79, 91 – 94] и др. в рамках теории упругости с поверхностными напряжениями исследовались механические свойства композитов со сферическими нановключениями (нанопорами), волокнистые и другие нанокompозиты. Модели поверхностной упругости применялись также для термоупругих материалов в [92, 99 – 101] и др., а отдельно модель поверхностной теплопроводности, аналогичная модели Гуртина-Мурдоха, для чисто температурных задач использовалась в [102, 103] и др.

1.4. Постановки задач теории упругости с поверхностными и интерфейсными напряжениями для анизотропных неоднородных тел

Рассмотрим V – представительный объем композитного тела с наноразмерными включениями. Данный объект состоит из объединения двух частей $V = V^f \cup V^p$. Будем считать, что объем V^f заполнен основным материалом первой фазы композита и представляет собой связанную конструкцию, состоящую из соединенных между собой трехмерных ячеек Гибсона-Эшби или из одной ячейки. Вторая область V^p – совокупность объемов, заполненных гипотетическим упругим материалом с очень малыми упругими жесткостями. Данная область моделирует пустоты в пористом материале. Пусть $\Gamma = \partial V$ – внешняя граница области V , $\mathbf{n} = \{n_1, n_2, n_3\}$ – вектор внешней единичной нормали, направленный наружу по отношению к области V ; $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$ – радиус-вектор в декартовой системе координат; а $\Gamma^s = \partial V^f \cap \partial V^p$ – граница между материалами первой и

второй фазы. Данная граница в модели Гуртина-Мурдоха играет очень существенную роль, поскольку на ней возникают поверхностные напряжения в наномасштабных задачах.

Примем, что материал в области V^f является упругим, в общем случае анизотропным, и характеризуется плотностью ρ_f и упругими жесткостями $c_{\alpha\beta}^f$. В области V^p для фиктивного материала примем: $\rho_p = \eta\rho_f$, $c_{\alpha\beta}^p = \eta c_{\alpha\beta}^f$, где $\eta \ll 1$. Таким образом, область V рассматривается как упругий композит с кусочно-неоднородными плотностью ρ и упругими модулями $c_{\alpha\beta}$: $\rho = \rho_e$, $c_{\alpha\beta} = c_{\alpha\beta}^e$, $\mathbf{x} \in V_e$, $e = f, p$. При этом в случае пористого композита параметр контраста η между модулями различных фаз имеет экстремально малое значение.

Задача гомогенизации состоит в том, чтобы, зная материальные модули и геометрические характеристики фаз композита, определить эффективные свойства $c_{\alpha\beta}^{eff}$ эквивалентной гомогенной среды, а затем при необходимости получить из них другие эффективные упругие характеристики, как например, эффективный модуль Юнга E^{eff} , эффективный модуль сдвига G^{eff} и эффективный коэффициент Пуассона ν^{eff} . В качестве критерия эквивалентности примем равенство энергии композита U и энергии однородной среды U_0 в объеме V при некоторых одинаковых внешних воздействиях.

Рассмотрим в представительном объеме V статическую задачу теории упругости для вектора перемещений $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \{u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x}), u_3(\mathbf{x})\}$ со специальными граничными условиями на внешней границе $\Gamma = \partial V$. Уравнения линейной теории упругости запишем в векторно-матричном виде:

$$\mathbf{L}^*(\nabla) \cdot \mathbf{T} = 0, \quad (1.4.1)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{S}, \quad (1.4.2)$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{L}(\nabla) \cdot \mathbf{u}, \quad (1.4.3)$$

$$\mathbf{L}^*(\nabla) = \begin{bmatrix} \partial_1 & 0 & 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ 0 & \partial_2 & 0 & \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.4.4)$$

где $\mathbf{T} = \{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}\}$ – массив, состоящий из компонент тензора напряжений σ_{ij} , $\mathbf{S} = \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12}\}$ – массив, состоящий из компонент тензора деформаций $\varepsilon_{kl} = (u_{k,l} + u_{l,k})/2$, \mathbf{c} – матрица 6×6 упругих жесткостей $c_{\alpha\beta}$, $(\dots)^*$ – операция транспонирования.

Здесь и далее латинские индексы изменяются в пределах от 1 до 3, а греческие – в пределах от 1 до 6. При переходе от тензорных обозначений σ_{ij} , ε_{kl} , c_{ijkl} к векторно-матричным обозначениям Фойхта T_α , S_β , $c_{\alpha\beta}$ используются стандартные формулы соответствия между индексами $(ij) \Leftrightarrow \alpha$, $(kl) \Leftrightarrow \beta$: $(11) \Leftrightarrow 1$, $(22) \Leftrightarrow 2$, $(33) \Leftrightarrow 3$, $(23) \sim (32) \Leftrightarrow 4$, $(13) \sim (31) \Leftrightarrow 5$ и $(12) \sim (21) \Leftrightarrow 6$.

В соответствии с моделью Гуртина-Мурдоха предполагается, что на наноразмерных межфазных границах Γ^S существуют поверхностные напряжения и выполняется следующее условие

$$\mathbf{L}^*(\mathbf{n}) \cdot [\mathbf{T}] = \mathbf{L}^*(\nabla^S) \cdot \mathbf{T}^S, \quad \mathbf{x} \in \Gamma^S, \quad (1.4.5)$$

где $[\mathbf{T}] = \mathbf{T}^{(1)} - \mathbf{T}^{(2)}$ – скачок напряжений на границе раздела фаз; ∇^S – поверхностный набла-оператор, который удовлетворяет равенству $\nabla^S = \nabla - \mathbf{n} \left(\frac{\partial}{\partial r} \right)$, где r – координата, отсчитываемая по нормали к Γ^S ; $\mathbf{T}^S = \{\sigma_{11}^S, \sigma_{22}^S, \sigma_{33}^S, \sigma_{23}^S, \sigma_{13}^S, \sigma_{12}^S\}$ – массив, состоящий из компонент тензора поверхностных напряжений σ_{ij}^S . Для поверхностных напряжений \mathbf{T}^S будем соответственно использовать «поверхностный» закон Гука в предположении отсутствия остаточных поверхностных натяжений

$$\mathbf{T}^S = \mathbf{c}^S \cdot \mathbf{S}^S, \quad (1.4.6)$$

$$\mathbf{S}^S = \mathbf{L}(\nabla^S) \cdot \mathbf{u}^S, \quad (1.4.7)$$

$$\mathbf{u}^S = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{nn}^*, \quad (1.4.8)$$

где \mathbf{c}^S – матрица размера 6×6 поверхностных упругих модулей жесткости $c_{\alpha\beta}^S$; $\mathbf{S}^S = \{\varepsilon_{11}^S, \varepsilon_{22}^S, \varepsilon_{33}^S, \varepsilon_{23}^S, \varepsilon_{13}^S, \varepsilon_{12}^S\}$ – массив, состоящий из компонент ε_{kl}^S тензора поверхностных деформаций; \mathbf{u}^S – вектор поверхностных перемещений, \mathbf{I} – единичная матрица размера 3×3 .

Предположим, что объемные и поверхностные потенциальные энергии тела положительно определены относительно компонент тензоров деформации, содержащихся в массивах \mathbf{S} и \mathbf{S}^S , соответственно. Из этого требования следуют свойства симметрии и положительной определенности матриц жесткостей \mathbf{c} и \mathbf{c}^S по отношению к массивам \mathbf{S} и \mathbf{S}^S .

Более точно мы можем описать поверхностные величины в локальной системе координат, связанной с конкретной точкой $\mathbf{x} \in \Gamma^S$, с тангенциальными ортами $\tilde{\mathbf{e}}_1 = \boldsymbol{\tau}_1$, $\tilde{\mathbf{e}}_2 = \boldsymbol{\tau}_2$ и нормалью $\tilde{\mathbf{e}}_3 = \mathbf{n}$. В этой локальной системе $\mathbf{u}^S = \{\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, 0\}$, $\nabla^S = \{\tilde{\partial}_1, \tilde{\partial}_2, 0\}$ и $\mathbf{S}^S = \{\tilde{\varepsilon}_{11}, \tilde{\varepsilon}_{22}, 0, 0, 0, 2\tilde{\varepsilon}_{12}\}$. Кроме того, подматрица 3×3 , которая входит в матрицу

поверхностных модулей упругости должна быть симметричной и положительно определенной:

$$\tilde{\mathbf{c}}^s = \begin{bmatrix} \tilde{c}_{11}^s & \tilde{c}_{12}^s & \tilde{c}_{16}^s \\ & \tilde{c}_{22}^s & \tilde{c}_{26}^s \\ sym & & \tilde{c}_{66}^s \end{bmatrix}.$$

Для того чтобы найти все компоненты эффективной матрицы жесткости \mathbf{c}^{eff} рассматриваемого композита, на внешней границе Γ представительного объема в соответствии с классическим вариантом метода эффективных модулей [36, 37] зададим линейные по пространственным координатам \mathbf{x} краевые условия для перемещений

$$\mathbf{u} = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (1.4.9)$$

где $\mathbf{S}_0 = \{S_{01}, S_{02}, S_{03}, S_{04}, S_{05}, S_{06}\} = \{\varepsilon_{011}, \varepsilon_{022}, \varepsilon_{033}, \varepsilon_{023}, \varepsilon_{013}, \varepsilon_{012}\}$; $S_{0\beta}$ – некоторые независимые от \mathbf{x} постоянные величины.

Положим в (1.4.9) лишь одну из компонент массива \mathbf{S}_0 отличной от нуля:

$$S_{0\beta} = \delta_{\beta\zeta} S_0, \quad (1.4.10)$$

где $\delta_{\beta\zeta}$ – символ Кронекера, индекс ζ принимает какое-то определенное целое число от 1 до 6; S_0 – некоторая постоянная величина.

В соответствии с общей теорией, после решения задачи (1.4.1) – (1.4.10) с фиксированным значением $\zeta = 1, 2, \dots, 6$, и нахождения полей напряжений σ_{ij} , можно определить столбец матрицы эффективных модулей \mathbf{c}^{eff} с номером ζ :

$$c_{\alpha\zeta}^{eff} = \frac{\langle \sigma_{ij} \rangle}{\varepsilon_0}, \quad (1.4.11)$$

где $\varepsilon_0 = S_0$ при $\zeta = 1, 2, 3$; $\varepsilon_0 = 2S_0$ при $\zeta = 4, 5, 6$; и используются приведенные выше формулы соответствия между греческими и латинскими индексами $\alpha \Leftrightarrow (ij)$: $1 \Leftrightarrow (11)$, $2 \Leftrightarrow (22)$, $3 \Leftrightarrow (33)$, $4 \Leftrightarrow (23) \sim (32)$, $5 \Leftrightarrow (13) \sim (31)$ и $6 \Leftrightarrow (12) \sim (21)$.

Через символ $\langle (\dots) \rangle$ в (1.4.11) и далее обозначено осреднение по представительному объему:

$$\langle (\dots) \rangle = \langle (\dots) \rangle_V + \langle (\dots) \rangle_\Gamma, \quad \langle (\dots) \rangle_V = \frac{1}{|V|} \int_V (\dots) dV, \quad \langle (\dots) \rangle_\Gamma = \frac{1}{|\Gamma^s|} \int_{\Gamma^s} (\dots) d\Gamma^s. \quad (1.4.12)$$

Отметим, что краевые задачи (1.4.1) – (1.4.10) отличаются от обычных упругих задач наличием для наноразмерных структур граничных условий на интерфейсе (1.4.5) – (1.4.8), которые типичны для модели поверхностных напряжений Гуртина-Мурдоха. Кроме

того, как мы можем видеть из (1.4.11), (1.4.12), для определения эффективных модулей при решении задач гомогенизации необходимо использовать интегрирование не только по объему с осреднением $\langle (\dots) \rangle_V$, но и интегрирование по поверхностям раздела фаз с осреднением $\langle (\dots) \rangle_\Gamma$.

В общем случае анизотропии требуется решить шесть задач (1.4.1) – (1.4.10) при $\zeta = 1, 2, \dots, 6$, которые в совокупности позволяют найти эффективные модули для всех шести столбцов матрицы \mathbf{c}^{eff} . Как несложно заметить, первые три задачи с $\zeta = 1, 2, 3$ являются задачами о растяжении объема V вдоль осей x_1, x_2, x_3 соответственно, а задачи с $\zeta = 4, 5, 6$ являются задачами о сдвигах представительного объема в различных плоскостях.

Описанный выше метод эффективных модулей основывается на том, что для задач (1.4.1) – (1.4.10) для композитного материала с модулями $c_{\alpha\beta}$ и для гомогенного тела с модулями $c_{\alpha\beta}^{eff}$ при одинаковых внешних воздействиях (1.4.9), (1.4.10) средние деформации оказываются одинаковыми $\langle \mathbf{S} \rangle_V = \langle \mathbf{S}_0 \rangle_V = \mathbf{S}_0$ и выполняется тождество Хилла [36, 37]:

$$\langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{T} \rangle = \langle \mathbf{S} \rangle_V \cdot \langle \mathbf{T} \rangle. \quad (1.4.13)$$

Поэтому принятие условия равенства потенциальных энергий $U = U_0$, $U = \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{T} \rangle / 2$ и $U_0 = \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{T}_0 \rangle / 2$, влечет за собой равенство средних напряжений

$$\langle \mathbf{T} \rangle = \langle \mathbf{T}_0 \rangle = \mathbf{T}_0. \quad (1.4.14)$$

которое обосновывает метод определения эффективных жесткостей по формулам (1.4.11), (1.4.12)

В случае материала ромбической системы матрица упругих жесткостей имеет девять независимых компонент. Например, матрицу податливостей $\mathbf{s} = \mathbf{c}^{-1}$ можно представить в виде

$$\mathbf{c}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/E_1 & -\nu_{12}/E_1 & -\nu_{13}/E_1 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{21}/E_2 & 1/E_2 & -\nu_{23}/E_2 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{31}/E_3 & -\nu_{32}/E_3 & 1/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/G_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{13} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{12} \end{bmatrix},$$

причем в силу симметрии матрицы жесткости выполняются равенства

$$\nu_{12}/E_1 = \nu_{21}/E_2, \quad \nu_{13}/E_3 = \nu_{31}/E_3, \quad \nu_{23}/E_2 = \nu_{32}/E_3,$$

где E_i – модули Юнга, ν_{ij} – коэффициенты Пуассона, G_{ij} – модули сдвига.

Для материала гексагонального класса сингонии имеется пять в общем случае отличных друг от друга упругих модулей, поскольку дополнительно выполняются равенства

$$E_1 = E_2, \quad \nu_{13} = \nu_{23}, \quad G_{23} = G_{13}, \quad c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2.$$

Для изотропного материала имеется только два независимых модуля, поскольку

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}, \quad (1.4.15)$$

$$E = E_1 = E_2 = E_3, \quad \nu = \nu_{12} = \nu_{13} = \nu_{23}, \quad G = G_{12} = G_{13} = G_{23}.$$

Отметим, что если исходные модули двух фаз композита обладали каким-то одним и тем же типом анизотропии, то его эффективные модули могут иметь более сложный тип анизотропии, поскольку представительный объем может не иметь тех свойств симметрии, которые имеются у материальных свойств каждой фазы. Поэтому, решая задачи (1.4.1) – (1.4.10) при различных ζ и определяя по (1.4.11), (1.4.12) эффективные модули, надо проверять, каким типом анизотропии будет обладать гомогенный материал. При решении задач (1.4.1) – (1.4.10) численно методом конечных элементов равенства некоторых эффективных модулей могут выполняться не точно, а с некоторой погрешностью. Естественно, для оценки типа анизотропии эффективных модулей этой вычислительной погрешностью можно пренебречь.

Если данная задача применяется к изотропному материалу и представительный объем не имеет ярко выраженных геометрически анизотропных свойств, то для нахождения его эффективных констант достаточно решить всего одну задачу (1.4.1) – (1.4.10), например, с $\zeta = 1$. Но в данной работе рассматриваются композиты со сложной геометрической структурой, из-за которой представительный объем теряет изотропные свойства исходного материала. Для учета этого можно решить все шесть задач (1.4.1) – (1.4.10) и оценить степень различия модулей, получаемых из решений разных задач. В качестве меры анизотропии композитов, состоящих для материалов, которые первоначально были изотропными, обычно принимается коэффициент Зенера:

$$A^{eff} = \frac{2c_{44}^{eff}}{c_{11}^{eff} - c_{12}^{eff}}. \quad (1.4.16)$$

Обратим внимание на то, что для рассматриваемого случая, когда область V^p заполнена материалом с очень малыми модулями жесткости, можно решать задачу (1.4.1) – (1.4.10) только для области V^f с границей $\Gamma^f = \partial V^f$. Данную границу можно представить

в виде объединения внешних и внутренних границ $\Gamma^f = \Gamma^e \cup \Gamma^s$, где $\Gamma^e = \Gamma \cap \partial V^f$ – внешняя граница. В таком случае условия (1.4.9), (1.4.10) необходимо задавать только на границе Γ^e . Действительно, при малых модулях жесткости $c_{\alpha\beta}^p = \eta c_{\alpha\beta}^f$, где $\eta \ll 1$, эффективные модули, рассчитанные по (1.4.11) из решения задач гомогенизации в V и в V^f , будут практически совпадать. Поэтому осреднение по (1.4.12) в (1.4.11) для задач гомогенизации в V^f надо заменить на осреднение по объему V функций, заданных только в V^f :

$$\langle (\dots) \rangle = \langle (\dots) \rangle_f = \frac{1}{|V^f|} \left(\int_{V^f} (\dots) dV + \int_{\Gamma^s} (\dots) d\Gamma^s \right). \quad (1.4.17)$$

Для высокопористых материалов первый вариант задач гомогенизации более удобен для теоретического обоснования метода, а второй вариант более удобен для практического решения. В связи с этим, для кубических моделей представительных объемов со случайной структурой пористости далее будем использовать первый вариант с решением задач гомогенизации в V , а для высокопористых композитов – второй вариант с решением задач гомогенизации только в V^f .

1.5. Обобщенная постановка задачи

Для того, чтобы численно решать поставленные задачи (1.4.1) – (1.4.9) с любым из случаев (1.4.10), необходимо перейти к слабым или обобщенным постановкам и затем использовать классическую технику конечно-элементных аппроксимаций. В предыдущем разделе использовались векторные функции \mathbf{u} , определенные в области V . На множестве векторных функций $\mathbf{u} \in C^1$, которые удовлетворяют однородному граничному условию (1.4.9), то есть $\mathbf{u} = 0$ на Γ , введем скалярное произведение

$$(\mathbf{v}, \mathbf{u})_{H_u^1} = \int_V \mathbf{S}^*(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{u}) dV + \int_{\Gamma^s} \mathbf{S}^{s*}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{S}^s(\mathbf{u}) d\Gamma^s, \quad (1.5.1)$$

где через H_u^1 обозначено замыкание множества векторных функций $\mathbf{u} \in C^1$.

Сформулируем понятие обобщенного или слабого решения. Для этого скалярно умножим уравнения (1.4.1) – (1.4.3) на произвольную вектор-функцию $\mathbf{v} \in H_u^1$. Интегрируя полученные уравнения по V и используя стандартную технику интегрирования по частям с помощью уравнений (1.4.1) – (1.4.8), получим интегральное соотношение:

$$c(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = 0, \quad (1.5.2)$$

где

$$c(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = c_V(\mathbf{v}, \mathbf{u}) + c_{\Gamma^S}(\mathbf{v}, \mathbf{u}), \quad (1.5.3)$$

$$c_V(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \int_V \mathbf{S}^*(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{u}) dV, \quad (1.5.4)$$

$$c_{\Gamma^S}(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \int_{\Gamma^S} \mathbf{S}^{S*}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{c}^S \cdot \mathbf{S}^S(\mathbf{u}) d\Gamma^S. \quad (1.5.5)$$

Далее представим решение \mathbf{u} задачи (1.4.1) – (1.4.9) в виде суммы:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_d + \mathbf{u}_b, \quad (1.5.6)$$

где $\mathbf{u}_d \in H_u^1$ удовлетворяет однородным граничным механическим условиям, а \mathbf{u}_b удовлетворяет неоднородным граничным условиям на границе Γ . Таким образом, примем, что на Γ выполняется условие:

$$\mathbf{u}_d = 0, \quad \mathbf{u}_b = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (1.5.7)$$

Подставим уравнение (1.5.6) в (1.5.2) и получим следующие уравнения:

$$c(\mathbf{v}, \mathbf{u}_d) = L_u(\mathbf{v}), \quad L_u(\mathbf{v}) = -c(\mathbf{v}, \mathbf{u}_b). \quad (1.5.8)$$

После данных преобразований мы можем сформулировать понятие обобщенного или слабого решения статической задачи теории упругости (1.4.1) – (1.4.9).

Определение. Функция $\mathbf{u} = \mathbf{u}_d + \mathbf{u}_b$, для которой выполняется условие (1.5.7), является обобщенным (слабым) решением задачи (1.4.1) – (1.4.9), если равенство (1.5.8) с (1.5.3) – (1.5.5), (1.5.7) выполняется для любого $\mathbf{v} \in H_u^1$.

1.6. Конечно-элементные аппроксимации

Для того, чтобы численно решить поставленные задачи (1.4.1) – (1.4.9) в слабой форме, воспользуемся классической техникой конечно-элементных аппроксимации. Пусть конечно-элементная сетка занимает область V_h , такую что

$$V_h \subseteq V, \quad V_h = \bigcup_k V^{ek}, \quad (1.6.1)$$

где V^{ek} – отдельно взятый конечный элемент с номером k . Примем, что конечно-элементная сетка подразделяется на «подсетки» быть двух типов: V_h^f и V_h^p , каждая из

которых соответствует определенной фазе. При этом выполняются следующие условия:

$$V_h^f \approx V^f, V_h^p \approx V^p \text{ и } V_h = V_h^f \cup V_h^p.$$

В таком случае приближенное решение $\mathbf{u}_h \approx \mathbf{u}$ можно искать в виде:

$$\mathbf{u}_h(x) = \mathbf{N}_u^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}, \quad (1.6.2)$$

где \mathbf{N}_u^* – матрица базисных функций (функций формы) для перемещений, \mathbf{U} – вектор узловых перемещений.

Расположим на границе двух фаз сетку Γ_h^s , состоящую из поверхностных конечных элементов. Сетка Γ_h^s должна быть согласованной с V_h , то есть все узлы каждого элемента сетки Γ_h^s должны совпадать с соответствующими узлами сетки V_h . Для сетки Γ_h^s также должны выполняться следующие равенства

$$\Gamma_h^s = \partial V_h^f \cup \partial V_h^p, \quad \Gamma_h^s = \bigcup_m \Gamma_{em}^s, \quad (1.6.3)$$

где Γ_{em}^s – отдельный поверхностный конечный элемент с номером m .

В соответствии с обычной конечно-элементной техникой аппроксимируем континуальную задачу. Для этого подставляем (1.5.2) и аналогичные представления проекционных функций в слабую постановку задачи упругости для V_h , и в результате получаем следующую конечно-элементную систему

$$\mathbf{K}_{uu} \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1.6.4)$$

где \mathbf{K}_{uu} – глобальная конечно-элементная матрица жесткостей, которая получается в результате ансамблирования (Σ^a) соответствующих элементных матриц:

$$\mathbf{K}_{uu} = \sum^a \mathbf{K}_{uu}^{ek}. \quad (1.6.5)$$

Элементные матрицы \mathbf{K}_{uu}^{ek} состоят из матриц двух видов:

$$\mathbf{K}_{uu}^{ek} = \{ \mathbf{K}_{uuV}^{ek} \wedge \mathbf{K}_{uu\Gamma}^{ek} \}. \quad (1.6.6)$$

В (1.5.6) \mathbf{K}_{uuV}^{ek} – элементная матрица жесткости, соответствующая объемному элементу с номером k , $\mathbf{K}_{uu\Gamma}^{ek}$ – элементная матрица жесткости, соответствующая плоскому (поверхностному) элементу. Они вычисляются следующим образом

$$\mathbf{K}_{uuV}^{ek} = \int_{V_h} \mathbf{B}_u^{ek*} \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{B}_u^{ek} dV, \quad \mathbf{K}_{uu\Gamma}^{ek} = \int_{\Gamma_h^s} \mathbf{B}_u^{sek*} \cdot \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{B}_u^{sek} d\Gamma, \quad (1.6.7)$$

где

$$\mathbf{B}_u^{ek} = \mathbf{L}(\nabla) \cdot \mathbf{N}_u^{ek*}, \quad \mathbf{B}_u^{sek} = \mathbf{L}(\nabla^s) \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{N}_u^{ek*}, \quad (1.6.8)$$

\mathbf{N}_u^{ek*} – матрицы функций формы для перемещений, заданных на отдельных объемных или поверхностных конечных элементах.

Обратим внимание, что конечно-элементное решение можно также представить в другом виде. Перепишем приближенное решение \mathbf{u}_h в виде суммы

$$\mathbf{u}_h = \mathbf{u}_{dh} + \mathbf{u}_{bh}, \quad (1.6.9)$$

для которой выполняются следующие соотношения

$$\mathbf{u}_{dh} \approx \mathbf{u}_d, \quad \mathbf{u}_{dh} = \mathbf{N}_{ud}^* \cdot \mathbf{U}_d, \quad (1.6.10)$$

$$\mathbf{u}_{bh} \approx \mathbf{u}_b, \quad \mathbf{u}_{bh} = \mathbf{N}_{ub}^* \cdot \mathbf{U}_b, \quad (1.6.11)$$

где \mathbf{u}_d и \mathbf{u}_b – функции, удовлетворяющие однородным и неоднородным граничным условиям, соответственно, а во вторых формулах в (1.6.10), (1.6.11) \mathbf{N}_{ud} , \mathbf{N}_{ub} , \mathbf{U}_d и \mathbf{U}_b – части матрицы \mathbf{N}_u и вектора \mathbf{U} , такие, что:

$$\mathbf{N}_u = \{\mathbf{N}_{ud}, \mathbf{N}_{ub}\}, \quad \mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \mathbf{U}_d \\ \mathbf{U}_b \end{Bmatrix}. \quad (1.6.12)$$

Представим также глобальную конечно-элементную матрицу жесткостей \mathbf{K}_{uu} следующем блочном виде:

$$\mathbf{K}_{uu} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu}^{dd} & \mathbf{K}_{uu}^{db} \\ \mathbf{K}_{uu}^{bd} & \mathbf{K}_{uu}^{bb} \end{bmatrix}. \quad (1.6.13)$$

Следовательно, уравнение (1.6.4) с уравнений (1.6.12), (1.6.13) можно переписать в виде:

$$\mathbf{K}_{uu}^{dd} \cdot \mathbf{U}_d = \mathbf{F}_u^d, \quad \mathbf{F}_u^d = -\mathbf{K}_{uu}^{db} \cdot \mathbf{U}_b. \quad (1.6.14)$$

Итак, задача гомогенизации упругого композита с поверхностными напряжениями на границе раздела двух фаз может быть решена с помощью метода конечных элементов. Результирующая система конечных элементов (1.6.14) для наноразмерных композитов отличается от аналогичных систем для макроразмерных тел наличием матриц \mathbf{K}_{uu}^{ek} . Данные матрицы необходимы для учета поверхностных эффектов, возникающих на границе раздела фаз.

В заключении отметим, что описанный подход может быть применен для вычисления механических свойств двухфазных композитов, состоящих из матрицы V^f и включений V^p . Случай пористых материалов при таком подходе может рассматриваться как частный, когда для материала второй фазы в V^p задаются пренебрежимо малые значения модулей жесткости.

Глава 2. Методы генерации представительных объемов

2.1. Моделирование представительного объема со случайным распределением пор

Реализацию подхода, описанного в разделах 1.4. – 1.6. будем выполнять в конечно-элементном программном комплексе ANSYS. Пусть представительный объем V имеет форму куба со стороной равной \tilde{L} . Так как рассматриваемая задача является линейной относительно пространственных размеров, то значение \tilde{L} не существенно для определения эффективных модулей рассматриваемого представительного объема, следовательно, для удобства примем размер ячейки, как безразмерную величину, равную $L = 1$. Далее разобьем представительный объем одинаковыми элементами в форме кубиков так, чтобы вдоль каждой оси было расположено n элементов. Таким образом, исходный представительный объем будет разбит на n^3 гексаэдральных конечных элементов.

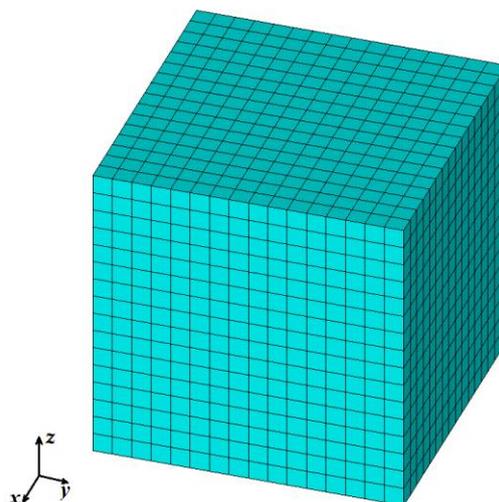


Рис. 2. Пример представительного объема, содержащего по $n = 16$ элементов вдоль каждой оси

В качестве типа конечных элементов был выбран объемный восьмиузловой гексаэдральный упругий элемент SOLID185 с тремя степенями свободы перемещений в каждом узле.

Как описано выше, представительный объем состоит из двух фаз $V = V_f \cup V_p$. Разделим элементы полученной модели на два типа. Элементам первой фазы зададим материальные свойства упругого тела, а элементам второй фазы – пренебрежимо малые модули жесткости. Изначально представительный объем состоит только из элементов первого типа, то есть реальная пористость равна $P = 0\%$. Затем, в соответствии с ожидаемой пористостью, случайным образом выбирается некоторое количество элементов, которым задаются материальные свойства пор.

Вычислим количество таких элементов. Пусть P_0 – ожидаемая пористость представительного объема, вычисляемая в процентах. Введем $p_0 = 0.01P_0$ – долю пористости в представительном объеме. Так как n – количество элементов вдоль оси, то представительный объем содержит всего n^3 элементов, значит количество элементов, соответствующих второй фазе, вычисляется по формуле:

$$k_{e2} = p_0 \cdot n^3 \quad (2.1.1)$$

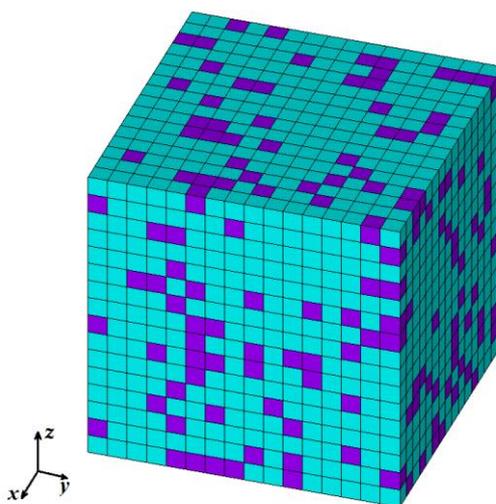


Рис. 3. Пример представительного объема с пористостью $P = 20\%$ и количеством элементов вдоль каждой оси $n = 16$

На рис. 3 изображен представительный объем, состоящий из элементов двух видов. Элементы бирюзового цвета имеют физические константы материала первой фазы, а фиолетовые элементы соответствуют второй фазе. Несмотря на то, что элементы второй фазы выбираются случайным образом, объединение элементов первой фазы должно представлять собой связанную конструкцию, иначе модель является некорректной с точки зрения целостности конструкции. Однако представленный выше алгоритм не контролирует связность первой фазы, так как элементы второй фазы выбираются случайным образом. В таком случае построенная модель может состоять из нескольких отдельных несвязных тел, то есть модель будет некорректна и процесс построения представительного объема будет повторяться снова. В случае, когда процент пористости невысокий, связность первой фазы как правило сохраняется. При увеличении пористости связность теряется чаще, поэтому для данной модели ограничим максимально возможную пористость до 80%.

Приведенный выше алгоритм в идеале должен моделировать композит со связностью 3-0. Это означает, что должна поддерживаться только связность первой фазы, а элементы второй фазы или отдельные их совокупности будут изолированными, т.е.

полностью окруженными элементами первой фазы и не соприкасающимися друг с другом. Таким образом, поры в композите со связностью 3-0 должны представлять собой набор отдельных областей. Как отмечалось выше, в простом случайном алгоритме это, вообще говоря, не гарантируется. Более сложные алгоритмы, гарантирующие 3-0 связность, реализованы в пакете ACELAN-COMPOS. В этом же пакете можно строить и модели композитов 3-3 связности.

Рассмотрим ниже две модели ACELAN-COMPOS, в которых соблюдается как связность первой фазы, так и связность второй фазы.

2.2. Моделирование композитов со связностью 3-3

Композиты со связностью 3-3 представляют большой интерес для моделирования структур с большой открытой пористостью. При данном типе элементы обеих фаз композита должны быть связными, то есть представлять один непрерывный объект, причем по элементам каждой из фаз можно проложить путь через объем материала от начала до конца по всем трем координатным направлениям. Моделирование таких композитов проводилось в пакете ACELAN-COMPOS, разработанном на кафедре математического моделирования Южного федерального университета. В программном комплексе ACELAN-COMPOS изначально генерировалась сетка композита 3-3 с заданными параметрами. Описанный ниже процесс создания модели композита соответствует материалу работы [106]. Затем построенная модель сохранялась в файл. Также был разработан алгоритм, который считывал полученный файл и на его основе строил модель в пакете ANSYS, в котором проводились дальнейшие вычисления. Подробное описание алгоритма построения модели композита со связностью 3-3 в пакете ACELAN-COMPOS описано ниже.

Процесс построения композита связности 3-3 можно разделить на два этапа. На первом этапе генерируется минимальная структура, которая обеспечивает связность. На втором этапе к этой структуре добавляются элементы так, чтобы пористость композита соответствовала заданному значению. Пример работы алгоритма рассмотрим на базовом представительном объеме (домене), который состоит из числа $n = 8$ элементов вдоль одной из осей. Число 8 в разбиении представительного объема определяется удобствами реализации процедур проверки связности и формирования структур данных. Таким образом, модель, состоящая из m доменов вдоль одной оси, может состоять из $(8m)^3$ элементов.

Сначала аналогично разделу 2.1 строится представительный объем в форме куба. Затем он разбивается на конечные элементы так, чтобы n всегда было кратно 8. Все

элементы композита могут иметь либо метку 1, что соответствует первой фазе, либо метку 2, что соответствует второй фазе. Перед началом работы алгоритма все элементы представительного объема имеют метку материала 1. Затем у выбираемых элементов метка 1 изменяется на метку материала 2.

Первый этап заключается в построении путей от выбранного случайным образом опорного элемента с меткой 2 внутри текущего домена до каждого из восьми «угловых» элементов данного домена, которым также присваивается метка 2 (элементы фиолетового цвета). Опорными элементами не могут быть «элементы – якоря», которые обеспечивают связность материала 1 (элементы красного цвета, расположенные в центральных частях граней).

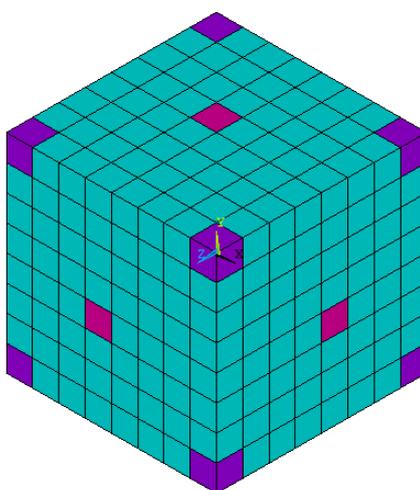


Рис. 4. Представительный объем с отмеченными угловыми элементами (фиолетовый цвет) и якорями (красный цвет)

При построении цепочки элементов от опорного элемента (светло-серый элемент с маркером А, рис. 5а) в определенный угол домена (элемент В на рис. 5а) на каждом шаге назначаются кандидаты, обеспечивающие кратчайший путь (рис. 5б, элементы, отмеченные темным кружочком). Среди кандидатов случайным образом выбирается элемент, которому присваивается метка материала 2, и назначаются новые кандидаты (рис. 5в). Далее этот процесс повторяется до тех пор, пока не будет достигнут «угловой» элемент. Отметим, что в процессе построения таких путей кандидатами могут быть назначены элементы, которые нарушают глобальную связность по материалу 1.

По окончании первого этапа связность по материалу с меткой 1 (в нашем случае это рассматриваемый материал) может быть нарушена. Статистически, на основе 500 тысяч численных экспериментов, это происходит примерно в 9% случаев. Поэтому после окончания первого этапа проводится проверка связности элементов материала 1. Если

условие связности не выполняется, то модель генерируется снова с выбором нового опорного элемента.

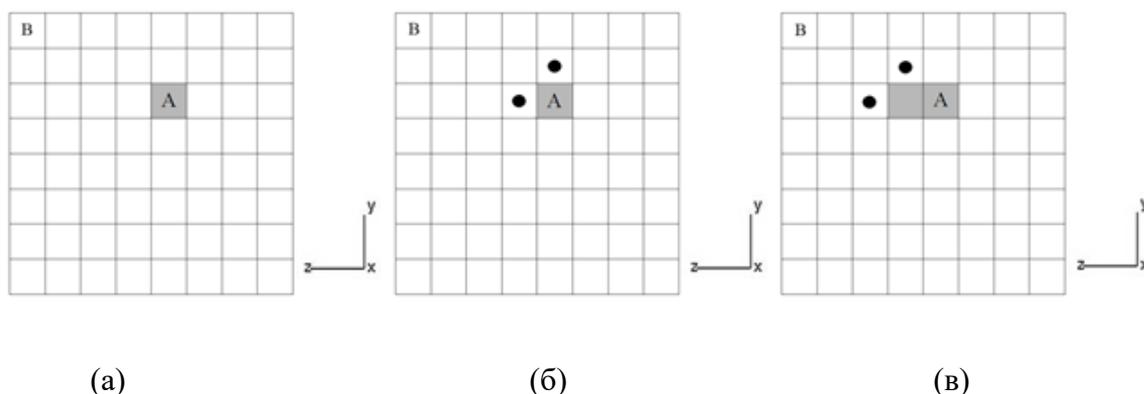


Рис. 5. Схема построения цепочки элементов от опорного к угловому

На рисунке 6 изображены элементы второй фазы, построенные на первом этапе генерации представительного объема. В данном случае вторая фаза занимает около 15% от всего объема модели. Далее необходимо увеличить количество элементов с меткой 2, чтобы процентное содержание таких элементов было приблизительно равно заданному значению. Для этого запускается второй этап генерации.

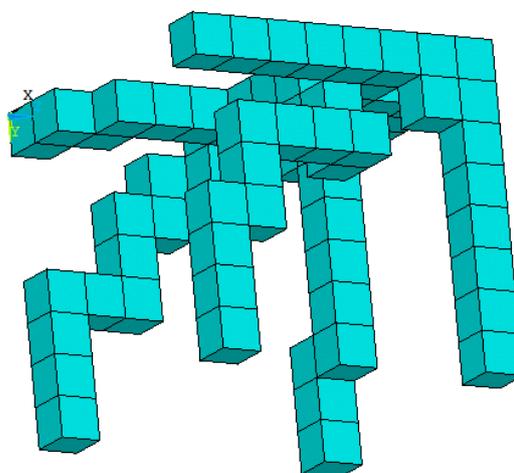


Рис. 6. Элементы второй фазы композита (поры), сгенерированные на первом этапе моделирования, $n = 8$

Вторым этапом является дополнение построенного каркаса материала 2 до заданного процентного соотношения. Последовательно случайным образом выбирается один из элементов, входящих во множество элементов с метками материала 2. Кандидатами на добавление являются все его смежные элементы, отмеченные меткой 1. Среди этих кандидатов случайным образом выбирается такой элемент, который не нарушает связности материала 1. На этом этапе проверка связности реализована при помощи алгоритма поиска

в ширину на графе, состоящем из элементов материала 1. Нарастивание происходит либо до достижения указанного процентного соотношения, либо до исчерпания всех возможных кандидатов.

Обратим внимание на то, что не только процентное соотношение, но и расположение пор влияет на эффективные свойства композита. В данном разделе применялся алгоритм, в котором угловые элементы являются элементами второй фазы (порами). Поэтому для полноты эксперимента рассмотрим также инвертированную 3-3 модель, в которой упругий материал относится к метке 2, а поры – к метке 1. В таком случае связности обеих фаз сохраняются, но меняется геометрия моделей.

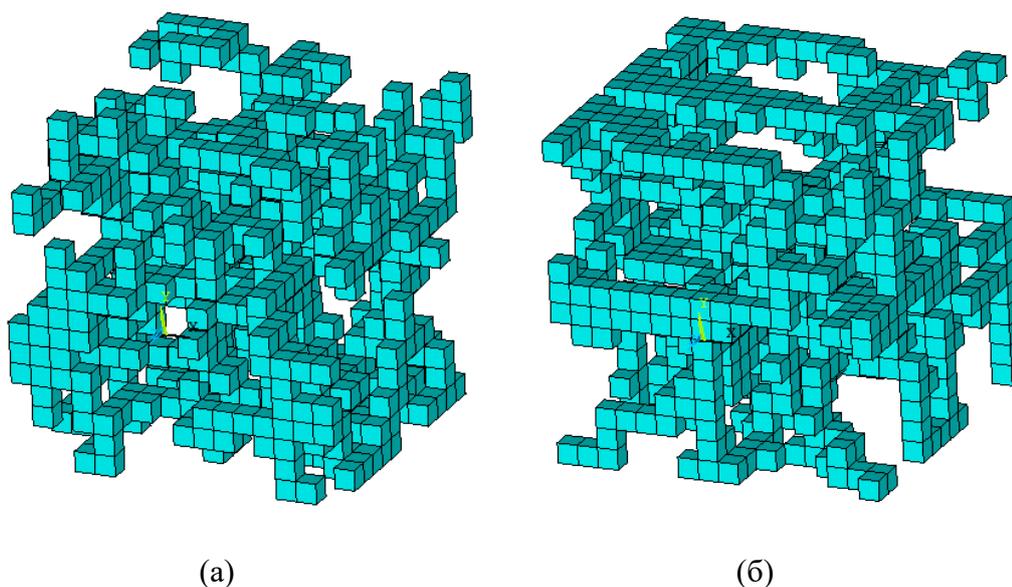


Рис. 7. Элементы первой фазы композита, сгенерированные: (а) – стандартным алгоритмом, (б) – инвертированным способом

На рисунке 7а и рисунке 7б приведены модели представительных объемов с количеством конечных элементов вдоль одной оси $n = 16$ и пористостью $P \approx 80\%$. Слева изображена модель, полученная стандартным алгоритмом 3-3 связности, а справа модель, полученная инвертированным способом.

Обратим также внимание на то, что ожидаемая пористость P_0 не всегда равна фактической пористости P . Это может произойти по двум причинам, связанным с тем, что нарастивание происходит либо до достижения указанного процентного соотношения, либо до исчерпания всех возможных кандидатов.

Первая причина возникает, когда на втором этапе во время нарастивания элементов с меткой 2 заканчиваются все возможные кандидаты. В таком случае $P < P_0$.

Вторая причина связана с общим количеством элементов. Если n^3 не кратен 100, то количество элементов второй фазы будет вещественным числом, так как по формуле

(2.1.1) $k_{e2} = p_0 \cdot n^3$, где $p_0 = 0.01P_0$. В таком случае k_{e2} равняется ближайшему целому, следовательно $P \approx P_0$.

2.3. Моделирование базовых регулярных решеток

Согласно классической модели Гибсона-Эшби [2, 18] высокопористый материал может быть представлен в виде массива ячеек (рис. 8а), составленных из тонких балок. Полученные аналитические формулы для данной модели основаны на решении задач о прогибе балки, и поэтому они справедливы только для высокопористых материалов, у которых характерная длина соединений значительно превосходит их ширину. В данном исследовании представлены конечно-элементные модели для численного определения эффективных упругих модулей пенообразного материала в представительных объемах, составленных из ячеек Гибсона-Эшби. Эти модели основаны не на балочных элементах, а на твердотельных элементах, что позволяет расширить геометрическую модель Гибсона-Эшби для материалов практически любой пористости.

Пусть ячейка решетки имеет размер \tilde{L} вдоль каждой оси декартовой системы координат. В силу линейности задачи относительно пространственных размеров, для определения эффективных модулей конкретное значение \tilde{L} не существенно, и для удобства расчетов можно отнести размер ячейки к \tilde{L} , то есть можно принять безразмерную длину ячейки $L = 1$. Все ребра имеют одинаковое квадратное поперечное сечение со стороной h , а размер внутреннего каркаса в форме куба, измеренный как расстояние между серединами двух противоположных параллельных ребер, равен a . В оригинальной работе Гибсона-Эшби [18] размер внутреннего каркаса a предполагается равным половине размера всей ячейки L , то есть $a = L/2$, тогда длина всех соединительных ребер равна $L/4$. Далее такую ячейку будем называть базовой ячейкой.

На рис. 8а изображен один из вариантов твердотельной модели базовой ячейки Гибсона-Эшби, сгенерированной в пакете ANSYS, а на рис. 8б показана та же модель в плоскости YZ ($x_1 = X, x_2 = Y, x_3 = Z$). Ячейка, изображенная на этом рисунке, имеет пористость $p = 0.95$ или $P = 100p = 95\%$, $h = 0.0785$ (м).

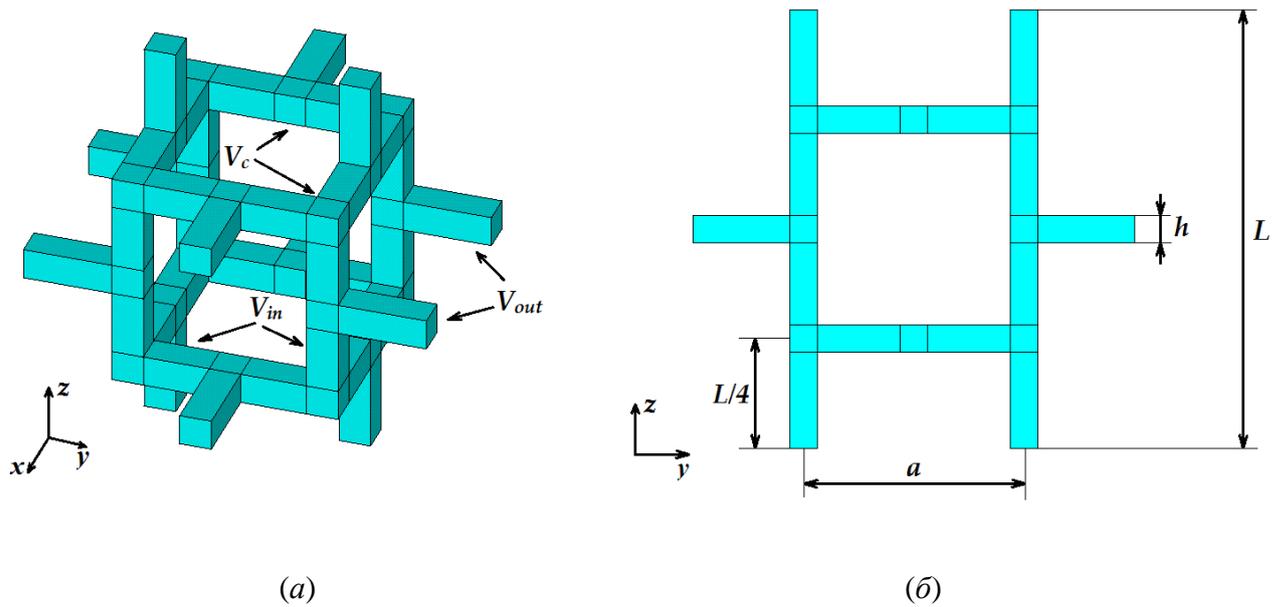


Рис. 8. Пример ячейки Гибсона-Эшби: (а) – общий вид в трехмерном пространстве, (б) – вид в плоскости YZ

Геометрические построения, конечно-элементные разбиения и численные эксперименты проводились в программном комплексе ANSYS. Для удобства и корректности формирования конечно-элементной сетки требуется, чтобы узлы соседних элементов совпадали. В связи с этим ячейка строилась из объемов трех видов, причем в два этапа. Сначала строилась основная часть ячейки, состоящая из внутреннего кубического остова. Эту часть в дальнейшем будем называть каркасом ячейки. После этого к каркасу достраивались внешние ребра.

На рис. 9а приведен пример построения нижней части каркаса. Она состоит из внутренних ребер V_{in} и соединительных кубических объемов V_c . Соединительные объемы располагаются на вершинах каркаса и на местах, в которых он стыкуется с внешними ребрами. Это необходимо для того, чтобы в дальнейшем не было проблем с генерацией регулярных конечно-элементных сеток при разбиении твердотельной модели на гексаэдральные конечные элементы. На рис. 9б приведен пример достроенного каркаса, который удовлетворяет описанным выше требованиям. На последнем этапе генерации отдельной ячейки достраиваются внешние ребра V_{out} , и в итоге получается базовая ячейка Гибсона-Эшби (см. рис. 8).

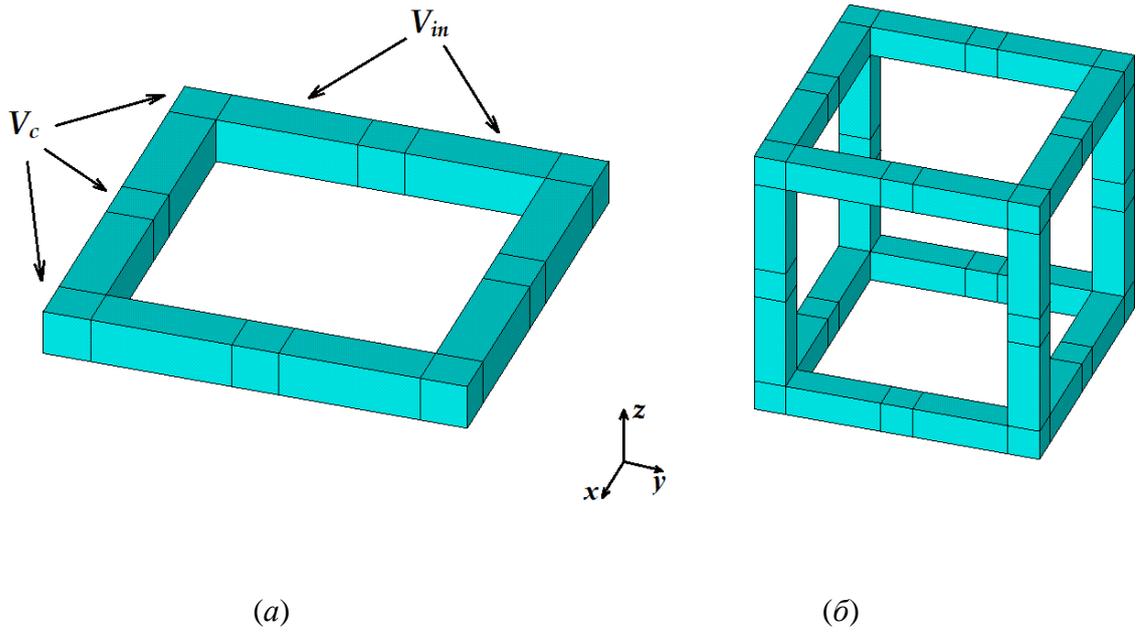


Рис. 9. Построение кубического каркаса ячейки: (а) – нижняя часть, (б) – полный кубический каркас

Как отмечалось ранее, согласно аналитической модели Гибсона-Эшби, отношение эффективного модуля Юнга пористого материала к модулю Юнга сплошного материала равно квадрату массовой доли пористого материала, т. е.

$$\frac{E}{E_0} = C_1(1 - p)^2, \quad (2.1.1)$$

где E – модуль Юнга пористого материала, E_0 – модуль Юнга сплошного материала, p – пористость, C_1 – константа, значение которой для открытой ячейки принято равным единице. В соответствии с формулой (2.1.1), эффективные характеристики пены зависят только от ее пористости и упругих модулей соответствующего сплошного материала. Заметим также, что при фиксированном размере каркаса пористость построенного представительного объема зависит только от толщины ребер h . Таким образом, получим формулу, связывающую толщину ребер и пористость. Как было показано выше, ячейка состоит из объемов трех видов, и таким образом общий объем одной ячейки V_f можно представить в виде суммы:

$$V_f = 20V_c + 24V_{in} + 12V_{out}, \quad (2.1.2)$$

где $V_c = h^3$, $V_{in} = \left(\frac{a}{2} - h\right)h^2$, $V_{out} = (L - a - h)h^2/2$.

С другой стороны, объем V_f , занимаемый материалом ячейки, можно определить через пористость p и объем гомогенной среды сравнения $V = L^3$:

$$V_f = (1 - p)V. \quad (2.1.3)$$

Подставляя (2.1.3) в (2.1.2), для общего случая получаем формулу:

$$p = 1 + 10h^3 - 6ah^2 - 6Lh^2. \quad (2.1.4)$$

Учитывая, что $L = 1$, $a = L/2$, перепишем (2.1.4) в виде:

$$p = 1 + 10h^3 - 9h^2, \quad (2.1.5)$$

где под обозначением h теперь надо понимать безразмерную толщину, отнесенную к L .

Уравнение (2.1.5) связывает пористость и толщину ребер. Задавая пористость p в (2.1.5) и решая кубическое уравнение с условиями $0 < h < 0,5$, получим соответствующее значение толщины ребра ячейки. Перед проведением численных экспериментов заранее был вычислен массив значений h при пористости от 5 % до 95 % с шагом 5 % (Таблица 1).

Таблица 1. Соответствие между пористостью и толщиной ребра базовой ячейки Гибсона-Эшби.

Пористость, P	Толщина ребра, h	Пористость, P	Толщина ребра, h
5%	0,4700709361	55%	0,2665277707
10%	0,4445105911	60%	0,2476157475
15%	0,4214495569	65%	0,2282622822
20%	0,4000000000	70%	0,2082505833
25%	0,3796492403	75%	0,1872894978
30%	0,3600617310	80%	0,1649518127
35%	0,3409959275	85%	0,140537585
40%	0,3222630913	90%	0,1127016654
45%	0,3037038920	95%	0,07799141985
50%	0,2851731132		

Заметим, что описанный выше алгоритм построения представительного объема справедлив только при $h < a/2$ (рис. 10а, б). Действительно, при $h > a/2$ кубические объемы, расположенные в углах и серединах каркаса, будут накладываться друг на друга (рис. 10в). Случай, когда $h = a/2$ не вызывает интереса, поскольку построение модели

происходит очень просто. Сначала строится внутренний каркас, который состоит только из соединительных кубических объемов V_c , а затем достраиваются внешние ребра V_{out} . Внутренние ребра V_{in} в таком случае не требуются. Также отметим, что в данном разделе рассматриваются только базовые ячейки, в которых $a = L/2$ и $L = 1$. Следовательно, рассматривается два алгоритма построения модели: при $h < 1/4$ и $h > 1/4$.

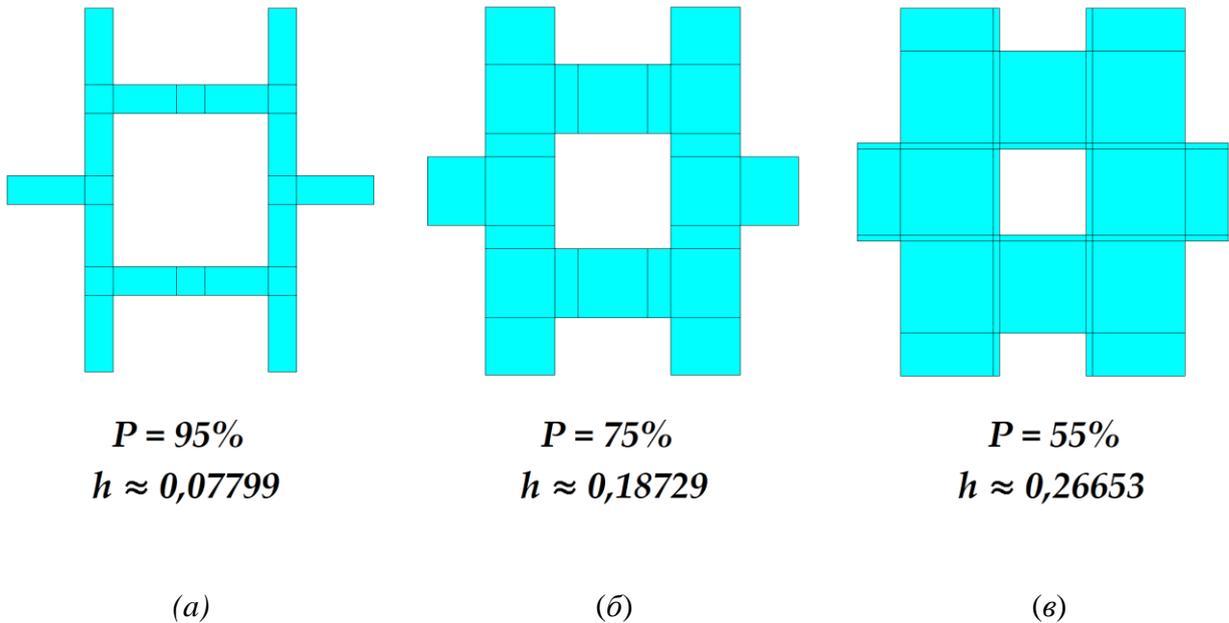


Рис. 10. Ячейки Гибсона-Эшби при различных толщинах ребер

Для того, чтобы избежать ошибок во время построения ячейки в случае $h > a/2$ воспользуемся другим алгоритмом. Для этого выделим предполагаемые пересечения больших соединительных кубов и построим меньшие объемы вдоль этих границ. Все полученные объемы являются непересекающимися, следовательно, геометрическая модель корректна, и конечно-элементная решетка будет строиться автоматически с помощью средств пакета ANSYS. На рис. 11а приведен пример построения нижней части каркаса ячейки с толстыми ребрами. На нем выделены все границы, по которым построены непересекающиеся объемы. Далее аналогично строится весь внутренний каркас. На последнем этапе, аналогично ранее описанному случаю ячеек с тонкими ребрами ($h < a/2$), достраиваются внешние ребра (рис. 11б). Обратим внимание, что внешние ребра также являются составными, следовательно границы всех объемов совпадают друг с другом, и в дальнейшем при построении конечно-элементной сетки узлы соседних элементов также будут совпадать.

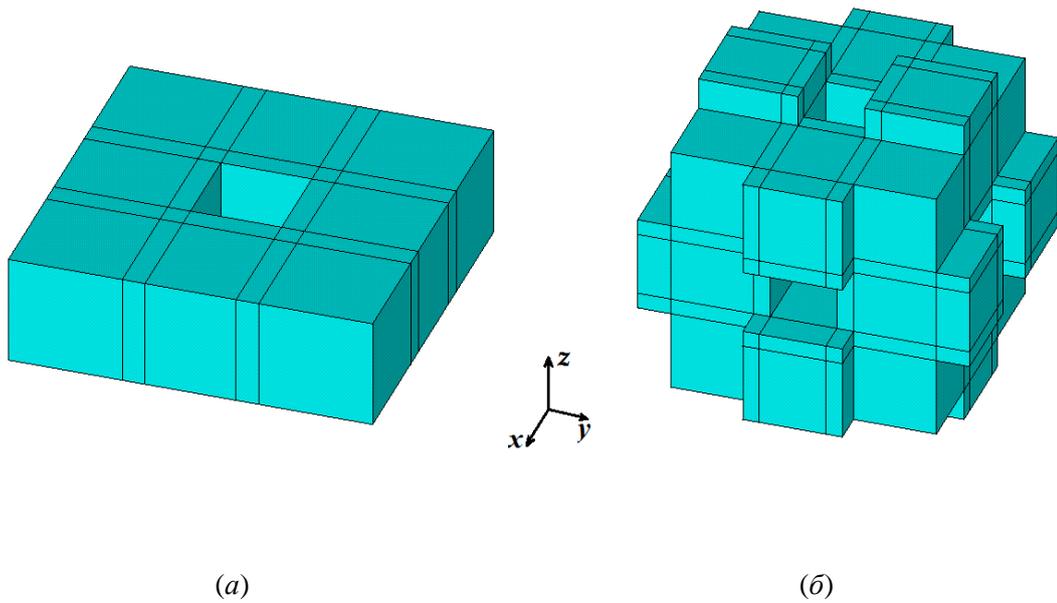
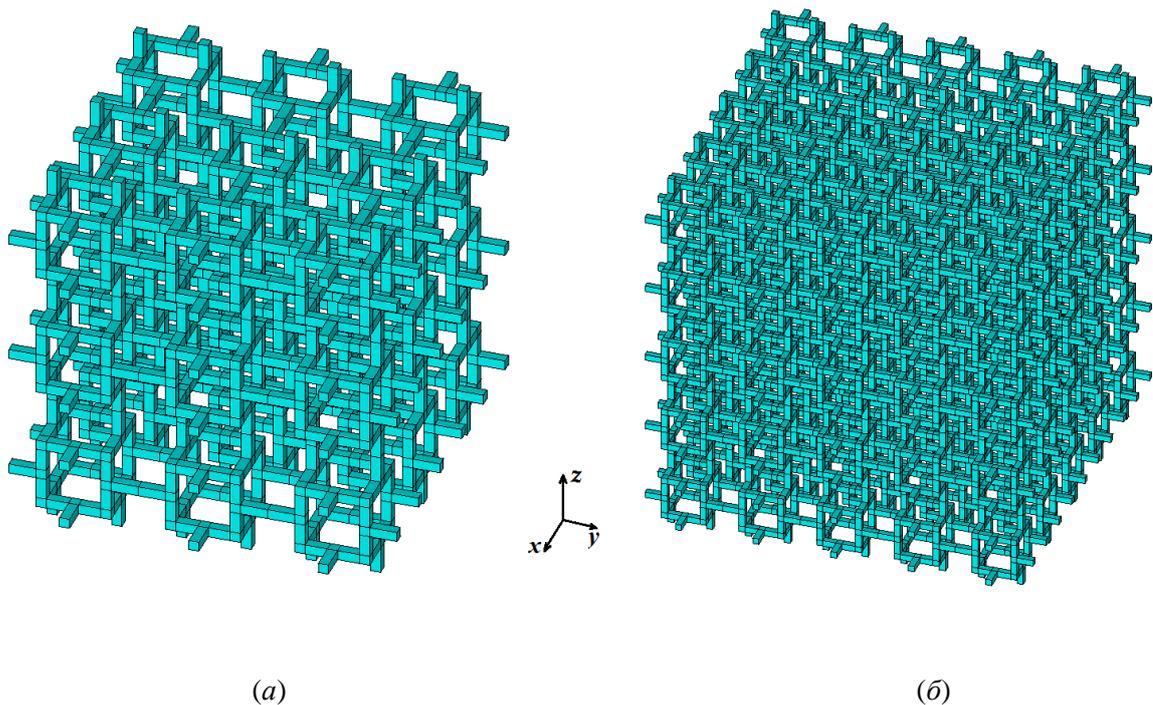


Рис. 11. Построение ячейки при больших толщинах ребер: (а) – нижняя часть кубического каркаса, (б) – полная ячейка

После завершения процесса генерации отдельной ячейки она транслируется вдоль трех осей координат заданное число раз n_c , в результате чего получается представительный объем пены в форме регулярной решетки с заданной пористостью P , соответствующей толщине ребер h . Здесь регулярной решеткой называется структура, которая состоит из одинаковых ячеек Гибсона-Эшби. В итоге материал пены имеет объем $V_l = n_c^3 V_f$. На рис. 12 изображены примеры регулярных решеток, составленных из разного количества ячеек как из тонких, так и из толстых ребер.



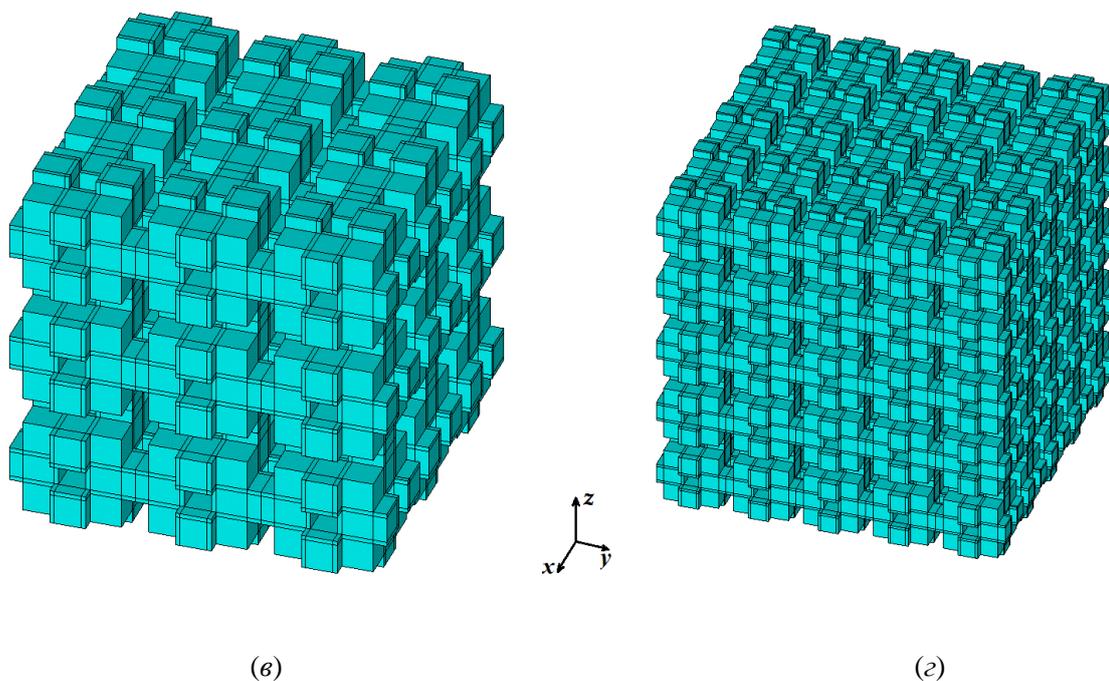


Рис. 12. Регулярные решетки: (а) – пористость $P = 95\%$, количество ячеек вдоль оси $n_c = 3$; (б) – пористость $P = 95\%$, количество ячеек вдоль оси $n_c = 5$; (в) – пористость $P = 50\%$, количество ячеек вдоль оси $n_c = 3$; (г) – пористость $P = 50\%$, количество ячеек вдоль оси $n_c = 5$

2.4. Моделирование нерегулярных решеток

Как известно [3, 9, 22], при производстве искусственных пен, размеры пор могут достаточно сильно отличаться друг от друга. Поэтому далее будет предложен алгоритм для моделирования нерегулярных решеток. Нерегулярной решеткой будем называть структуру, составленную из ячеек Гибсона-Эшби, размеры внутренних кубических каркасов которых выбираются случайным образом и, соответственно, могут отличаться друг от друга.

Сборка регулярной решетки из отдельных ячеек Гибсона-Эшби не вызывает никаких трудностей. Так как все ячейки идентичны, то они идеально стыкуются между собой внешними ребрами. В случае нерегулярной решетки алгоритм становится более сложным. Примем, что толщина балок h одинакова для всех ячеек, что обеспечивает наиболее простой контакт внешних ребер различных ячеек. Заметим, что при больших значениях h размеры внутреннего каркаса ячейки меняются в меньших пределах, чем при малых h . Поэтому в случае низкой пористости (толстых ребрах) решетка становится более регулярной. В связи с этим, нерегулярную решетку будем моделировать только для случая $h < a/2$.

Как было отмечено выше, нерегулярная решетка состоит из ячеек с разными размерами внутреннего каркаса a . С другой стороны, общий размер ячейки вдоль каждой оси декартовой системы координат постоянен и равен L . Из этого следует простая зависимость: чем больше каркас a , тем меньше внешние ребра, и наоборот. На рис. 13 изображены две ячейки с существенно различными размерами внутреннего каркаса. Рис 7а и рис. 13б демонстрируют ячейку с относительно большим размером каркаса, где (а) – ячейка в трехмерном пространстве, а (б) – ее проекция на ось YZ . Аналогичным образом на рис 7в и 7г изображена ячейка с относительно небольшим размером каркаса в пространстве (в) и в плоскости YZ (г).

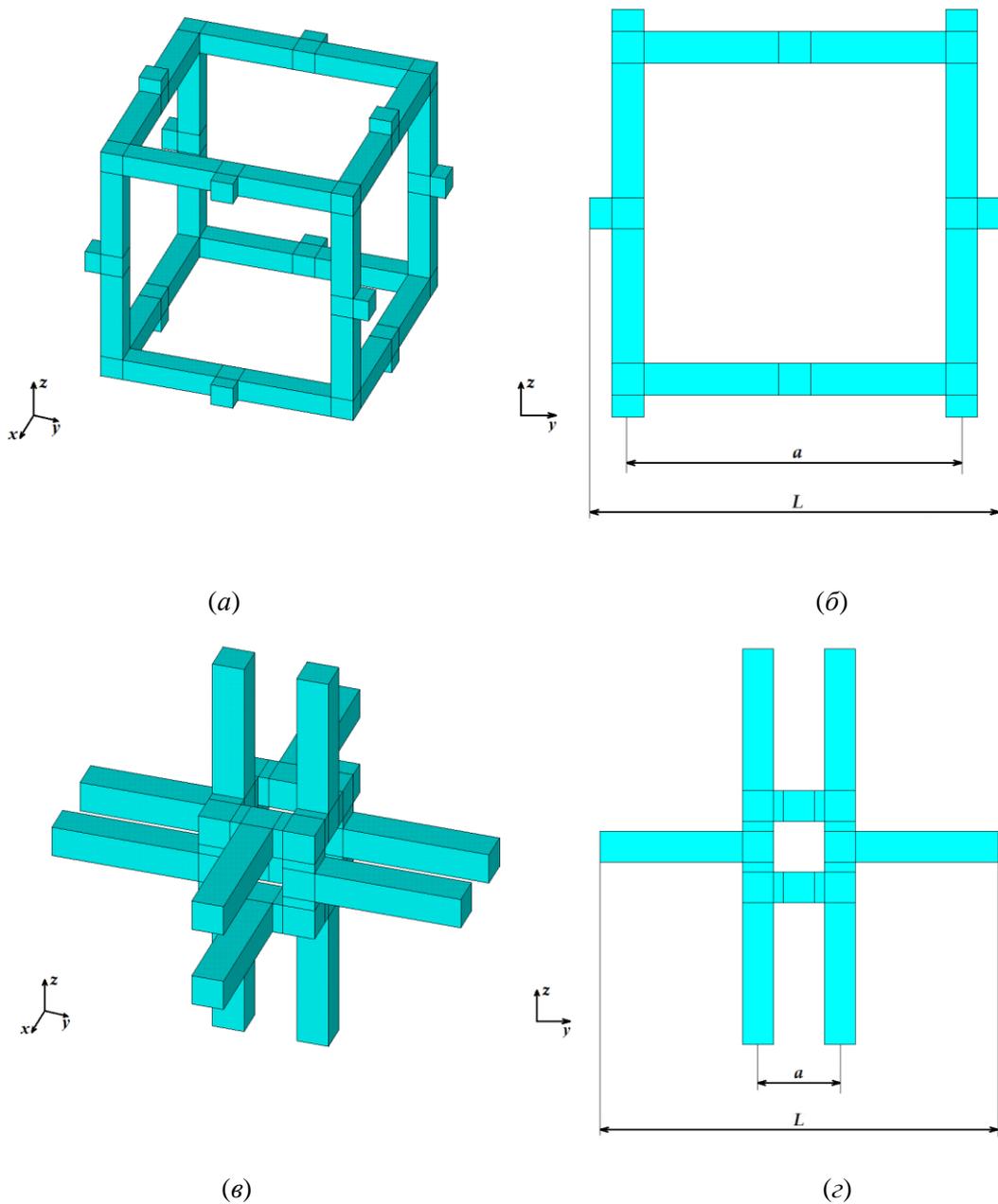


Рис. 13. Пример ячеек с различными размерами внутреннего каркаса и одинаковой толщиной ребер

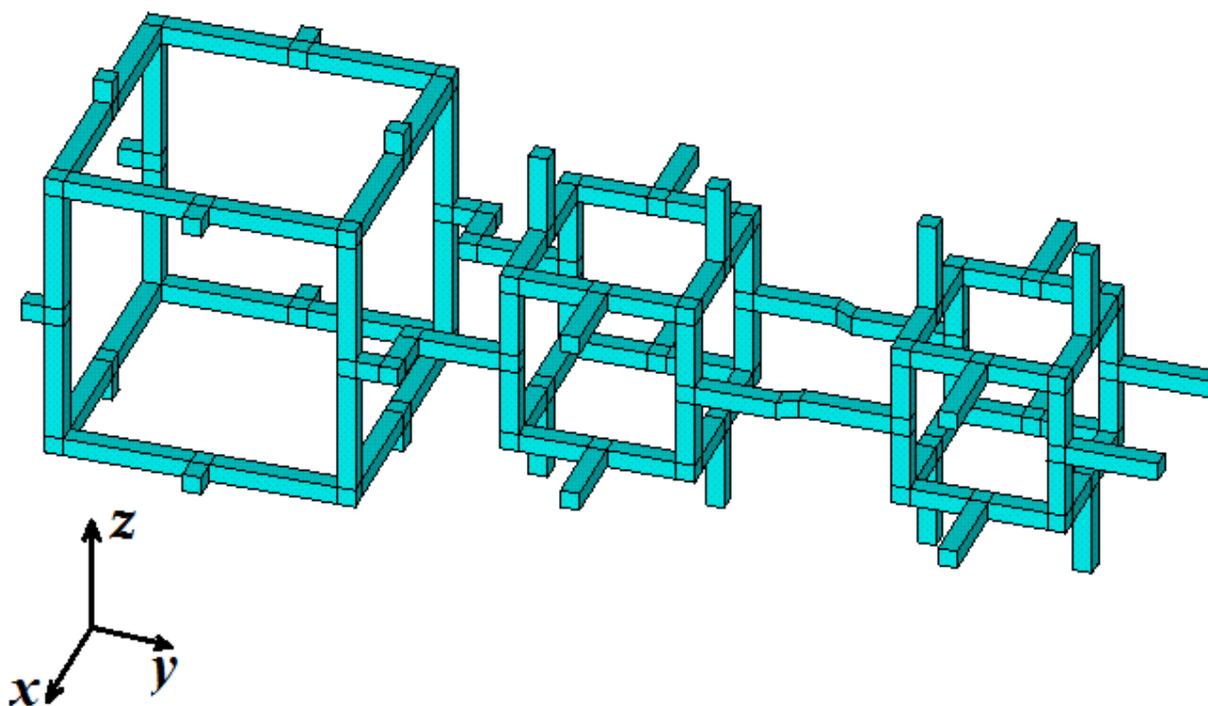
Введем необходимые ограничения на размеры каркаса a . Поскольку здесь рассматривается только случай тонких ребер, то размер внутренней части должен быть $a > 2h$. С другой стороны, желательно, чтобы структура ячейки сохранилась, а значит сохранились и внешние соединительные ребра. Следовательно, размер каркаса не может превышать $a < L - 2h$. Таким образом, получено аналитическое ограничение $a \in (2h, L - 2h)$. Но если размер a будет близок к крайним значениям, то при построении компьютерной модели появятся объемы, у которых размеры в одном измерении будут в несколько раз меньше размеров в других измерениях. В такой ситуации нужно будет генерировать или очень много конечных элементов с пропорциональными размерами, или использовать элементы с непропорциональными размерами по осям. Оба варианта являются плохими для расчетов. В первом варианте размеры конечно-элементных матриц будут очень большими и расчеты будут проводиться достаточно долго. Второй вариант может приводить к большим ошибкам в конечно-элементных решениях. В связи с этим, введем дополнительные ограничения на размер a для конечно-элементной модели: $a \in (2h + \delta, L - 2h - \delta)$, $\delta = 0,01L$.

Итак, выше был описан алгоритм построения ячеек с различными размерами внутреннего каркаса a и с соответствующими ограничениями для них. Далее представим алгоритм построения нерегулярных решеток, составленных из таких ячеек.

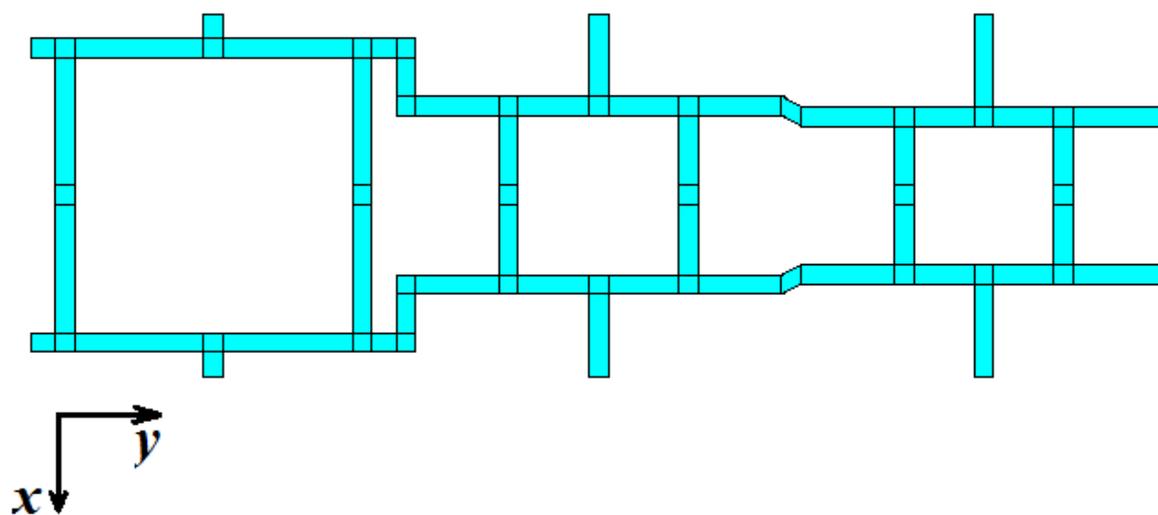
Примем, что толщина балок h одинакова для всех ячеек, что обеспечивает наиболее простой контакт внешних ребер различных ячеек. Перед началом геометрического построения всей структуры с использованием генератора случайных чисел создается массив, который содержит значения a для всех ячеек решетки. В данной работе проводились эксперименты для решеток, в которых случайная величина была определена двумя способами: по равномерному распределению и по нормальному распределению.

После того, как массив со значениями a сгенерирован, то в цикле строятся ячейки вдоль координатных осей по аналогии с регулярной решеткой. Так как размеры основных частей каждой ячейки, вообще говоря, различные, то и внешние ребра тоже различны. Следовательно, их необходимо соединить дополнительными перемычками, иначе вся решетка перестает быть связной. Эти дополнительные перемычки могут быть двух видов. В случае, если расстояние между внешними ребрами двух ячеек небольшое (меньше h), то дополнительные перемычки строятся под наклоном, как показано на рис. 14 между крайней правой и центральной ячейками. В случае, если расстояние между внешними ребрами

больше толщины самого ребра h , то дополнительные элементы строятся перпендикулярно внешним ребрам, как на показано рис. 14 между центральной и крайней левой ячейками.



(a)



(б)

Рис. 14. Нерегулярная цепочка из трех ячеек Гибсона-Эшби: (a) – общий вид в трехмерном пространстве, (б) – вид в плоскости XZ

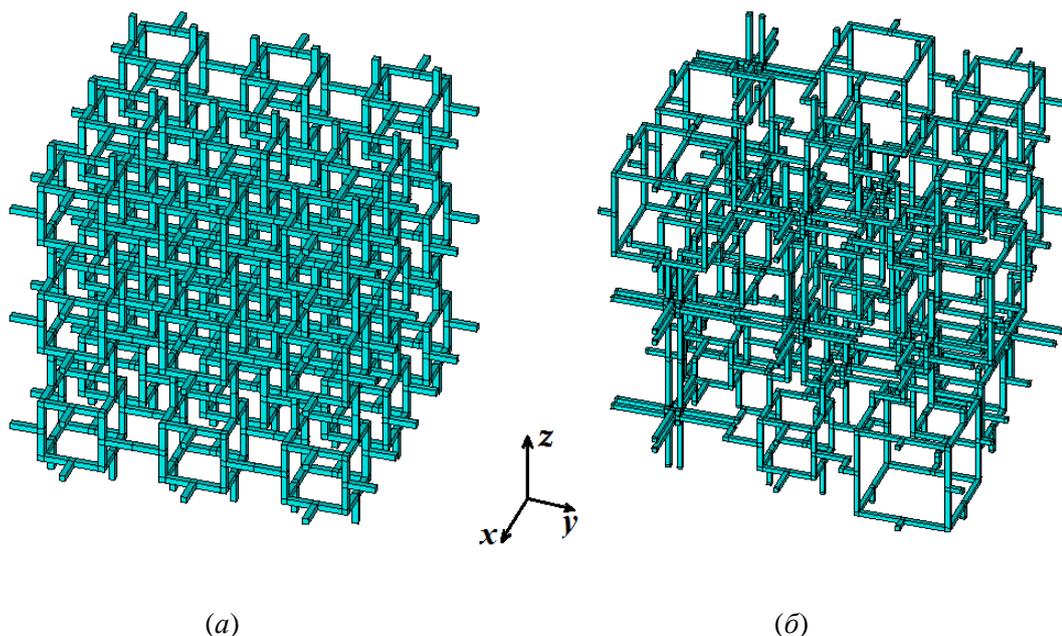


Рис. 15. Регулярная (а) и нерегулярная (б) решетки

На рис. 15 для наглядности приведены примеры регулярной (а) и нерегулярной (б) решеток, включающих по три ячейки вдоль каждой оси. Как можно заметить, в нерегулярном случае ячейки с большими каркасами могут генерироваться в случайных местах решетки. Естественно, что при этом ячейки с маленькими каркасами концентрируются в других местах. Такое расположение, очевидно, может приводить к геометрической анизотропии структуры, что повлечет за собой и анизотропию эффективной среды композита. Далее это будет подтверждено численными экспериментами.

2.5. Моделирование ячеек различной конфигурации с фиксированной пористостью

Отметим, что обычно в ячейке Гибсона-Эшби основными геометрическими параметрами являются длина каркаса a и толщина ребер h , а размер ячейки L либо не обсуждается, либо принимается равным $2a$. Таким образом, общая пористость ячейки p тогда зависит только от толщины ребер h . В модели, предлагаемой в данном разделе, в отличие от представленных ранее, в ячейке Гибсона-Эшби допустимо варьировать все три параметра L , a и h , через которые определяется общая пористость p ячейки. Если же зафиксировать размер L , то при задании пористости p можно найти соотношение между величинами a и h . Это свидетельствует о том, что ячейки Гибсона-Эшби с различными размерами каркасов и толщинами ребер могут иметь одинаковую пористость. Таким

образом, компьютерная модель может дополнить представленные ранее исследования, основанные на базовой ячейке Гибсона-Эшби.

Как отмечалось ранее, что моделируемая ячейка состоит из объемов трех видов: кубических объемов V_c со стороной h , объемов внутренних ребер V_{in} и объемов внешних ребер V_{out} . Из этого вытекает, что объем материала в ячейке Гибсона-Эшби V_f можно вычислить по формуле

$$V_f = 20V_c + 24V_{in} + 12V_{out}, \quad (2.3.1)$$

где

$$V_c = h^3, \quad V_{in} = \left(\frac{a}{2} - h\right)h^2, \quad V_{out} = \frac{(L - a - h)h^2}{2}. \quad (2.3.2)$$

Объем материала пористого тела V_f можно также определить через пористость p и объем сплошного куба $V = L^3$, в который можно вместить ячейку Гибсона-Эшби:

$$V_f = (1 - p)V. \quad (2.3.3)$$

Подставляя (2.3.2), (2.3.3) в (2.3.1), получаем зависимость длины каркаса от пористости и толщины ребер:

$$a(p, h) = \frac{(1 - p)L^3}{6h^2} + \frac{5}{3}h - L. \quad (2.3.4)$$

Таким образом, получена формула, связывающая основные геометрические параметры ячейки с пористостью. Зафиксировав, например, размер ячейки L , можно провести серию вычислительных экспериментов при различных процентах пористости p и толщинах ребер h . Естественно, что толщины ячеек могут изменяться в некоторых пределах. Данные граничные значения можно получить геометрически. На рис. 16 изображены проекции двух предельных случаев построения ячейки при одинаковой пористости 95% (слева наиболее тонкие ребра, справа – наиболее толстые). Поскольку $V_{in} > 0$, $V_{out} > 0$, введем параметр $\delta > 0$, который определяет длины внутренних и внешних ребер в предельных случаях и гарантирует, что их объемы не обратятся в ноль. Получим сначала предельные значения для длины каркаса ячейки a . Из рисунка 16б очевидно $a_{min} = 2h + 2\delta$, аналогично из рисунка 10а следует, что $a_{max} = L - h - 2\delta$. Подставляя a_{min} и a_{max} в уравнение (2.3.4), выразим предельные значения для h . Таким образом, получаем ограничения для a и h :

$$h \in \left[L - a - 2\delta, \frac{a}{2} - \delta \right], \quad (2.3.5)$$

$$a \in [2h + 2\delta, L - h - 2\delta], \quad (2.3.6)$$

Определим теперь значения параметра δ . Так как рассматриваются предельные случаи, то необходимо, чтобы δ стремился к нулю. Но тогда при построении появятся плоские объемы, то есть объемы, у которых размеры в одном измерении будут во много раз меньше размеров в других измерениях. В такой ситуации нужно будет генерировать или очень много конечных элементов с пропорциональными размерами, или использовать элементы с непропорциональными размерами по осям. Оба варианта являются плохими для численных расчетов. В первом варианте размеры конечно-элементных матриц будут очень большими, и расчеты будут проводиться достаточно долго. Второй вариант может приводить к большим ошибкам в конечно-элементных решениях. В связи с этим, был задан параметр $\delta = 0,01L$.

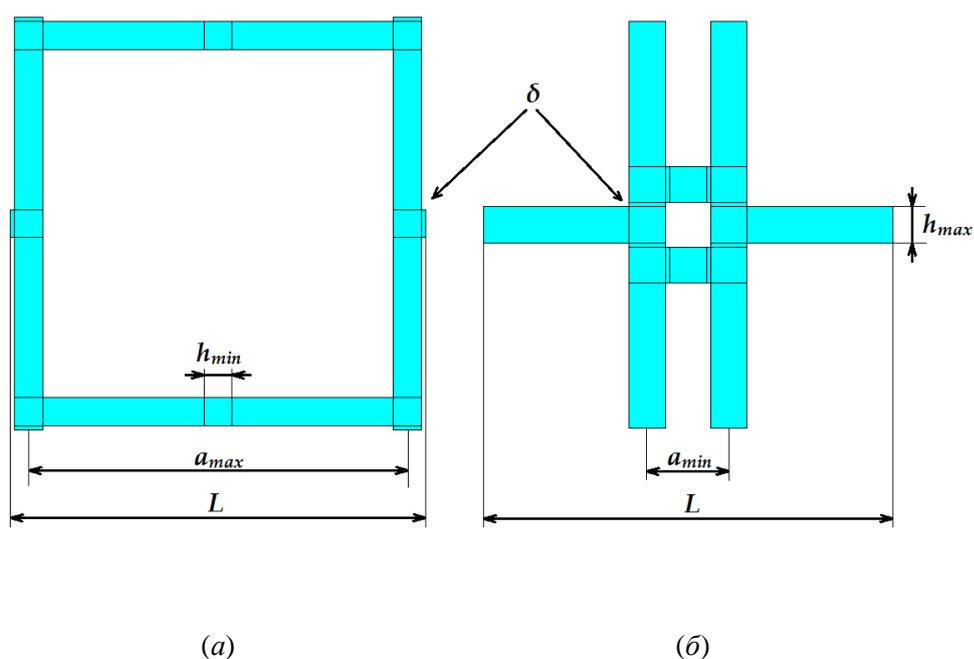


Рис. 16. Ячейки Гибсона-Эшби с равной пористостью 95% и различной геометрической конфигурацией: (а) – наибольший размер каркаса, (б) – наименьший размер каркаса

Границы (2.3.5), (2.3.6) с учетом (2.3.4) определяются неявно, поскольку $a = a(p, h)$. Таким образом, они зависят друг от друга и от пористости. Ниже приведена таблица 2 с предельными значениями при различной пористости ячейки.

Таблица 2. Предельные значения толщины ребер и размеров каркаса при различной пористости ячейки.

Пористость	65%	70%	75%	80%	85%	90%	95%
a_{min}	0,4812	0,4481	0,4119	0,3716	0,3256	0,2706	0,1982
a_{max}	0,7790	0,7969	0,8156	0,8354	0,8570	0,8815	0,9119
h_{min}	0,2010	0,1831	0,1644	0,1446	0,1230	0,0985	0,0681
h_{max}	0,2306	0,2140	0,1959	0,1758	0,1528	0,1253	0,0891

После завершения процесса генерации отдельной ячейки она транслируется вдоль трех осей координат заданное число раз n_c , в результате чего получается представительный объем пены в форме регулярной решетки с заданной пористостью p и с выбранной толщиной ребер h . В итоге материал пены имеет объем $V_l = n_c^3 V_f$.

Полученные объемы имеют различную внутреннюю структуру в зависимости от пористости и толщин ребер. Так, на рис. 17 изображены две решетки с пористостью $p = 0,8$, $P = 100p = 80\%$ при $L = 1$ (м), $n_c = 3$, и при минимальных и максимальных толщинах ребер, рассчитанных по (2.3.4) – (2.3.6) для данной пористости. В случае (а) толщина ребер минимальна $h = 0,1446$ (м), а в случае (б) – максимальна $h = 0,1758$ (м). Очевидно, что при увеличении толщины ребер, размер внутреннего каркаса уменьшается. Как будет показано ниже, это значительно влияет на эффективные жесткостные свойства решетки.

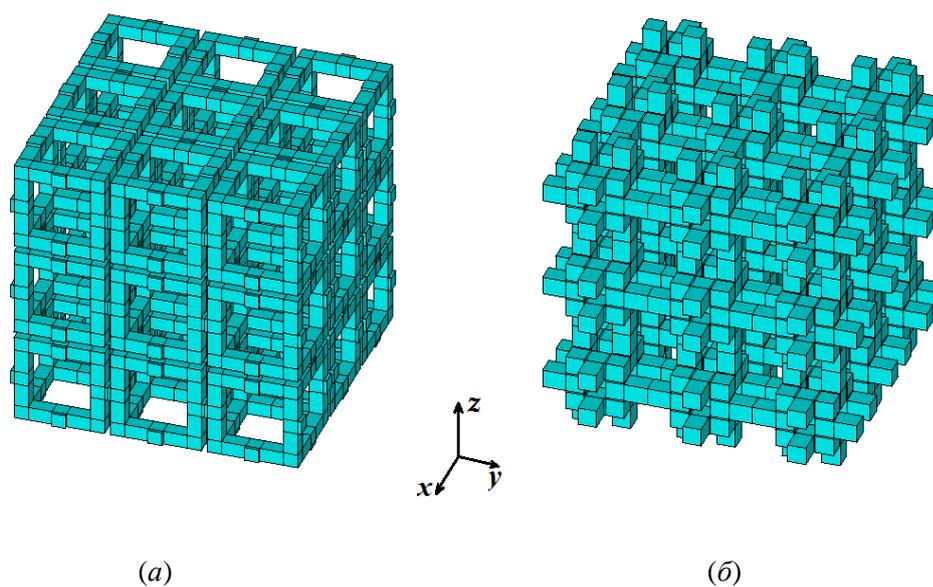


Рис. 17. Решетки с фиксированной пористостью и различной конфигурацией геометрии ячейки

2.6. Конечно-элементное разбиение и сходимость модели

На заключительном этапе для численного решения задач гомогенизации полученный представительный объем разбивался на конечные элементы. Для этих целей из библиотеки ANSYS был выбран объемный восьмиузловой гексаэдральный элемент структурного анализа SOLID185 (рис. 18) с тремя степенями свободы перемещений в каждом узле и оболочечный четырехузловой элемент SHELL181 с шестью степенями свободы перемещений и углов поворота в каждом узле, который при задаваемой мембранной опции также имеет только три степени свободы перемещений. Подробнее о мембранном элементе будет написано в разделе 2.7.

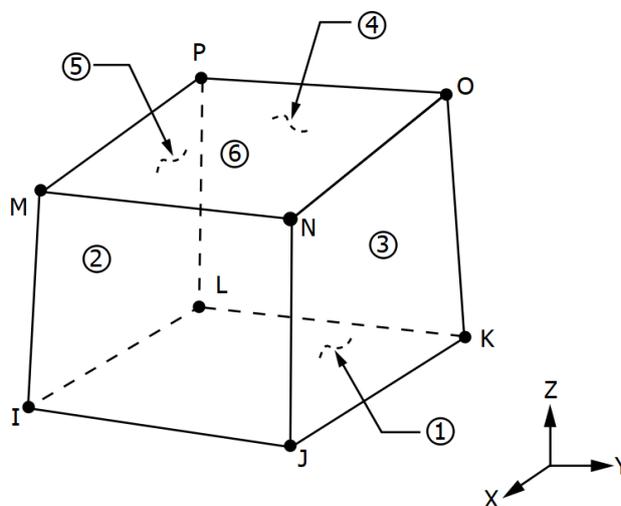


Рис. 18. Восьмиузловой гексаэдральный элемент SOLID185

Из-за геометрических особенностей ячейки представительный объем проблематично разбить трехмерными элементами равных размеров. Поэтому определим характерный размер объемного конечного элемента вдоль оси равным $l_e = L/n_e$, где n_e – количество объемных элементов в отдельной ячейке вдоль оси. Очевидно, что чем больше число n_e , тем больше общее число элементов и выше точность численного эксперимента, но, соответственно, и существенно больше время, затраченное на вычисления. Для определения оптимального размера конечных элементов l_e была проведена серия численных экспериментов при различных n_e , но при фиксированных пористости $P = 90\%$ и геометрической конфигурации $h = 0.165$, $a = 0.5$. Вычисления проводились для единичной ячейки $n_c = 1$, а также для решеток $n_c = 3, n_c = 5$. Ниже представлена таблица значений относительного модуля Юнга $r(E) = E^{eff}/E_f$ от количества конечных элементов, также в ней отображено количество конечных элементов.

Таблица 3. Таблица значений относительного модуля Юнга от размера конечно-элементной сетки.

n_e	$n_c = 1$		$n_c = 3$		$n_c = 5$	
	$r(E)$	Кол-во элементов	$r(E)$	Кол-во элементов	$r(E)$	Кол-во элементов
10	0,0513	352	0,0413	9504	0,0392	44000
15	0,0502	400	0,0407	10800	0,0388	50000
20	0,0473	1296	0,0385	34992	0,0366	162000
25	0,0460	2816	0,0376	76032	0,0359	352000
30	0,0450	5800	0,0369	156600	0,0352	725000
35	0,0446	9504	0,0366	256608	0,0349	1188000
40	0,0443	14504	0,0364	391608	0,0348	1813000
45	0,0441	16268	0,0363	439236		
50	0,0439	22528	0,0362	608256		
55	0,0437	33048	0,0360	892296		
60	0,0436	44000	0,0359	1188000		
65	0,0434	60016	0,0358	1620432		
70	0,0434	76032				
75	0,0433	77760				

Результаты, приведенные на рис. 19, демонстрируют сходимость конечно-элементных расчетов при вычислении относительного модуля Юнга $r(E)$. Желтая кривая на рисунке 19 соответствует значениям, вычисленным для одной ячейки Гибсона-Эшби, красная – для решетки размера $3 \times 3 \times 3$, синяя – для решетки размера $5 \times 5 \times 5$. Кривые для решеток на рисунке 19 заканчиваются раньше, чем кривая для одной ячейки, поскольку расчеты при росте числа n_e для решеток занимали очень много времени и поэтому не проводились при достижении разумных показателей сходимости. Аналогичная тенденция сходимости наблюдалась и для относительных модулей $r(C_{11})$, $r(C_{12})$, $r(\nu)$.

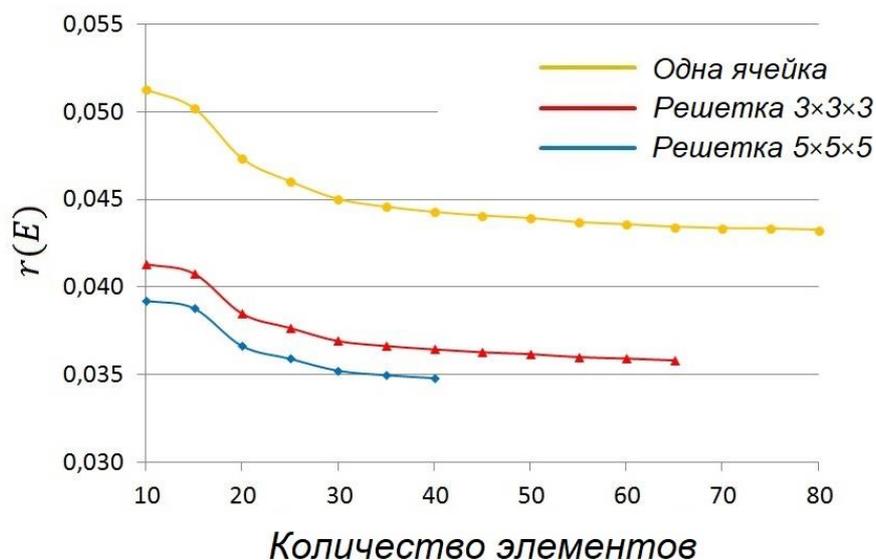


Рис. 19. Сходимость значений модуля Юнга в зависимости от числа n_e объемных конечных элементов вдоль оси

Отметим, что из числа n_e общее количество конечных элементов, включая как объемные, так и мембранные, определяется не по аналитическим формулам, а программным образом в ANSYS. Между тем, соответствующие значения числа конечных элементов N_1 , N_3 и N_5 связаны между собой простыми формулами: $N_3 = 27N_1$, $N_5 = 125N_1$. Эти соотношения очевидны, поскольку решетка размера $3 \times 3 \times 3$ состоит из 27 отдельных ячеек Гибсона-Эшби, а решетка размера $5 \times 5 \times 5$ состоит из 125 ячеек. Тем не менее колонки с числами N_3 , и N_5 приведены в таблице 3, чтобы показать, насколько большим становится общее число конечных элементов в решетках.

Обратим внимание на то, что для сходимости решеток требуется в несколько раз больше элементов, чем для сходимости единичной ячейки. В итоге на основе полученных результатов и с учетом среднего времени, потраченного на вычисление задачи гомогенизации были приняты следующие оптимальные размеры конечных элементов: $l_{e1} = L/60$, $l_{e3} = L/30$ и $l_{e5} = L/20$ для единичной ячейки $n_c = 1$ и для решеток $n_c = 3$ и $n_c = 5$, соответственно.

2.7. Моделирование мембранных элементов

Если характерные блоки пенообразного материала имеют наноразмеры, то обычные подходы макромеханики требуют изменений, поскольку у наноструктурированных композитов возникают различные аномальные свойства,

отличающие их от тел обычных размеров [35, 73]. Например, экспериментально установлено, что нанопористые материалы могут обладать большей жесткостью, чем аналогичные объекты обычных размеров. Среди ряда моделей, описывающих поведение упругих наноразмерных тел, наиболее популярной является модель Гуртина-Мурдоха, учитывающая поверхностные напряжения [76]. Эта модель широко используется и для моделирования наноструктурированных пенообразных материалов [93, 95 – 98]. В настоящей работе была выбрана данная модель, согласно которой при решении задач гомогенизации на наноуровне следует учитывать не только внешние, но и внутренние или интерфейсные границы представительных объемов, задавая на последних поверхностные напряжения.

С физической точки зрения эту модель можно рассматривать как модель упругого тела с прикрепленной на ее поверхности эластичной мембраной. Тензор усилий, действующий в мембране, может быть интерпретирован как тензор поверхностных напряжений. Таким образом, после моделирования основной решетки, на последнем этапе необходимо добавить элементы, которые будут учитывать поверхностные эффекты. Для этих целей используются мембранные (пластинчатые) упругие элементы, которые накладываются на поверхности ребер представительного объема. Из библиотеки ANSYS был выбран четырехузловой оболочный элемент SHELL181 (рис. 20). В общем виде каждый узел данного элемента имеет шесть степеней свободы: перемещения по координатам x, y, z и вращения вокруг осей x, y, z . В рассматриваемом случае выбиралась мембранная опция, при которой элемент имеет только степени свободы по перемещениям.

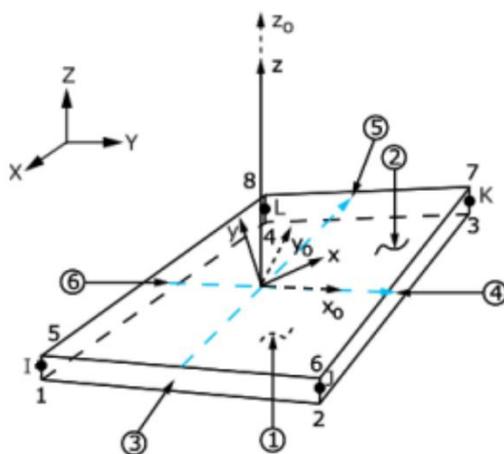


Рис. 20. Четырехузловой оболочный элемент SHELL181

Для кубических представительных объемов, составленных из геометрически одинаковых кубических конечных элементов, формирование мембранных элементов имело некоторые особенности. На первом этапе создавалась сетка из объемных гексаэдральных конечных элементов SOLID185 со свойствами двух фаз по алгоритмам, описанным в разделах 2.1, 2.2. На следующем шаге автоматическим образом генерировались оболочечные элементы SHELL181 с опцией мембранных напряжений, имитирующие интерфейсные границы. Для этого вначале выделялись конечные элементы с материальными свойствами пор. Полученный массив элементов по своим внешним границам покрывался ответными контактными элементами TARGE170 с помощью команды TSHAP,QUAD. Таким образом, грани всех конечных элементов со свойствами пор, выходящие на внешние поверхности массива этих элементов, оказывались покрытыми четырехузловыми контактными элементами (TARGE170 вида QUAD). Затем контактные элементы, находящиеся на внешней границе представительного объема, удалялись, а оставшиеся контактные элементы заменялись на четырехузловые оболочечные элементы SHELL181 с опцией только мембранных напряжений.

Для оболочечных элементов необходимо было еще обеспечить тип анизотропии, согласованный с анизотропией объемных конечных элементов. Для материала гексагональной сингонии данная процедура была реализована путем перестановки коэффициентов жесткости по строкам и столбцам, соответствующим осям z и y , для оболочечных элементов, расположенных перпендикулярно плоскости изотропии Oxy . В итоге все грани соприкосновения упругих структурных элементов с порами оказывались покрытыми мембранными упругими конечными элементами, моделирующими наличие поверхностных напряжений (1.4.5) – (1.4.8) на интерфейсных границах Γ^s .

Обратим внимание, что, согласно теории, поверхностные эффекты учитываются на интерфейсных границах композита, то есть на границах между материалом и порами. На внешних границах представительного объема задаются главные граничные условия в перемещениях. Кроме того, внешние границы являются условными, поскольку представительный объем в теории может рассматриваться как часть глобальной структуры композита. В связи с этим, мембранные элементы не накладываются на внешние границы представительного объема. В частном случае, когда рассматриваются ячейки Гибсона-Эшби, мембранные элементы не накладываются на внешние торцы ребер ячеек. На рисунке 21 приведены примеры построенных мембранных элементов для представительного объема со случайным расположением пор при пористости $P = 20\%$.

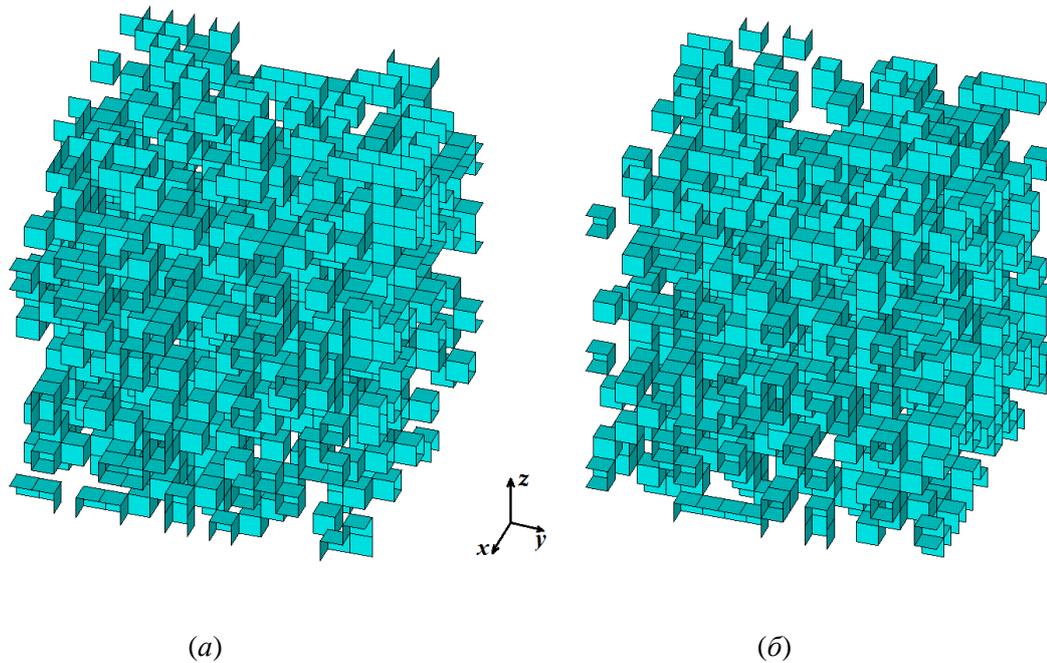


Рис. 21. Примеры массивов мембранных элементов на границах между двумя фазами при случайном распределении пор, пористость $P = 20\%$, относительная площадь мембранных элементов: (а) – $S_r \approx 2.424$, (б) – $S_r \approx 2.395$

Следует отметить, что из-за случайной расстановки пор, площадь мембранных элементов будет изменяться в некоторых границах от одного эксперимента к другому, и вследствие этого эффективные свойства всего композита также будут меняться. Введем параметр S_r – относительную площадь поверхностных элементов, который вычисляется следующим образом

$$S_r = \frac{S_s}{S_f}, \quad (2.7.1)$$

где S_s – площадь мембранных элементов, а $S_f = 6 \cdot L^2$ – общая площадь внешних граней представительного объема.

На рисунке 22 приведены примеры построенных мембранных элементов для отдельных ячеек Гибсона-Эшби. В данном случае изменение площади мембранных элементов происходит только при изменении пористости представительного объема. Следовательно, с изменением пористости меняется также вклад от поверхностного эффекта, который влияет на эффективные модули. Обратим также внимание, что на торцах ребер отсутствуют элементы, следовательно массив мембранных элементов представляет собой своеобразную структуру из "соединенных трубок".

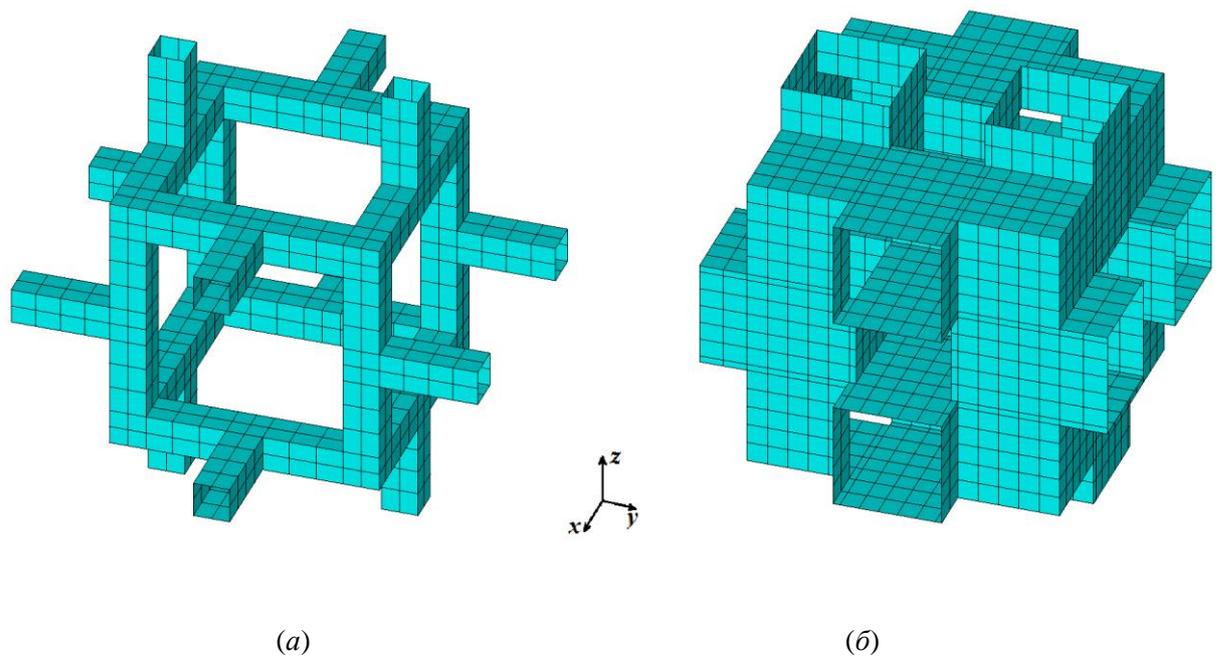


Рис. 22. Примеры массивов мембранных элементов на интерфейсных границах ячеек: (а) – пористость 95%, (б) – пористость 55%

При расчетах с использованием модели с поверхностными мембранами возникают две проблемы. Во-первых, при рассмотрении ячейки, как совокупности основного объема и поверхностного слоя, необходимо знать физические характеристики обеих частей, но данные по поверхностным модулям до сих пор нельзя считать полными и надежными. Во-вторых, в построенной конечно-элементной модели для мембран задаются объемный модуль Юнга E_m и толщина мембраны \tilde{h}_m . Как можно показать, мембранный элемент будет описывать эффект поверхностных напряжений, если $E_s = \tilde{h}_m E_m$. Введем теперь коэффициент пропорциональности $k_{ss} = E_m/E_f$. Тогда, варьируя k_{ss} можно будет менять значения поверхностных модулей: $E_s = \tilde{h}_m k_{ss} E_f$. Толщину мембраны \tilde{h}_m отнесем к размеру ячейки \tilde{L} , и для удобства расчетов будем использовать безразмерную толщину мембраны $h_m = 1$.

В статьях [97, 98] на основе решения задачи изгиба балки с поверхностными напряжениями была получена аналитическая модель зависимости эффективного модуля Юнга нанопористого материала от толщины ребра ячейки Гибсона-Эшби. На основе данных этих работ и численных результатов нашей модели, получена эмпирическая формула, связывающая коэффициент пропорциональности k_{ss} с реальным значением толщины ребра ячейки h (нм).

$$h = \frac{a}{k_{ss}^{4/9}} + b, \quad (2.4.1)$$

где $a = 0,2305177888$, $b = -0,5306719104$.

Таким образом, предложена конечно-элементная модель для нахождения эффективных характеристик наноразмерных пористых материалов, основанная на модели Гуртина-Мурдоха. Размерный эффект моделируется поверхностными мембранами на гранях интерфейсных элементов. Упругие модули, заданные на мембранах, связаны с упругими модулями исходного материала с помощью коэффициента пропорциональности k_{ss} . Однако, формально, k_{ss} – коэффициент, который никак не связан с размером ячейки. Поэтому на основе работ других авторов и проведенных в настоящем исследовании численных экспериментов была получена эмпирическая формула, связывающая k_{ss} с реальными размерами ячейки для моделей, основанных на ячейках Гибсона-Эшби.

Кроме того, при различных модификациях проведенных исследований применялись разные варианты обезразмеривания по пространству. Например, в [50], в отличие от [49], представительный объем задавался в безразмерном виде, причем сторона отдельного гексаэдрального конечного элемента принималась равной 1. Таким образом, параметр обезразмеривания по пространству равнялся минимальному размеру поры \tilde{l}_0 . Далее принималось, что поверхностные модули материала связаны с его объемными модулями $c_{\alpha\beta}$ по формуле $c_{\alpha\beta}^s = \tilde{l}_c c_{\alpha\beta}$, где, например, $\tilde{l}_c = 10^{-10}$ (м). Кроме того, поверхностные модули $c_{\alpha\beta}^s$ связаны с толщиной мембраны \tilde{h}_m и ее объемными модулями $c_{\alpha\beta}^m$ соотношением $c_{\alpha\beta}^s = \tilde{h}_m c_{\alpha\beta}^m$. Для модулей жесткости оболочечных элементов $c_{\alpha\beta}^m$ примем линейную связь с объемными модулями $c_{\alpha\beta}$ через коэффициент пропорциональности k_{ss} : $c_{\alpha\beta}^m = k_{ss} c_{\alpha\beta}$. Тогда имеем $c_{\alpha\beta}^s = \tilde{h}_m c_{\alpha\beta}^m = \tilde{h}_m k_{ss} c_{\alpha\beta} = \tilde{h}_m k_{ss} c_{\alpha\beta}^s / \tilde{l}_c$, и следовательно $\tilde{h}_m = \tilde{l}_c / k_{ss}$. Если теперь задать $\tilde{h}_m = \tilde{l}_0$, то $\tilde{l}_0 = \tilde{l}_c / k_{ss}$, и поэтому коэффициент k_{ss} обратно пропорционален минимальному размеру пор \tilde{l}_0 . Далее безразмерный минимальный размер пор l_0 принимается равным 1, т.е. он считается отнесенным к \tilde{l}_0 . Безразмерная толщина оболочечных элементов h_m тогда также оказывается равной 1, поскольку $\tilde{h}_m = \tilde{l}_0$, $h_m = \tilde{h}_m / \tilde{l}_0 = 1$. Теперь при дальнейших исследованиях можно варьировать коэффициент k_{ss} и пористость p . Полученные в итоге результаты для значений эффективных модулей будут означать, что при расчетах поверхностные модули были приняты равными $c_{\alpha\beta}^s = k_{ss} \tilde{l}_0 c_{\alpha\beta}$. Если из каких-либо экспериментов известны поверхностные модули $c_{\alpha\beta}^s$, и был задан коэффициент k_{ss} , то полученные результаты будут соответствовать композиту с минимальным размером пор $\tilde{l}_0 = c_{\alpha\beta}^s / (k_{ss} c_{\alpha\beta})$.

Глава 3. Вычислительные эксперименты по определению эффективных модулей пористых анизотропных упругих материалов с интерфейсными напряжениями

3.1. Численные эксперименты для композитов кубической формы и различной пористости с учетом поверхностных напряжений

В данном разделе приводятся результаты численных экспериментов, реализованных на представительных объемах, рассмотренных в разделах 2.1 и 2.2. Поверхностные эффекты, возникающие в наноразмерных масштабах, моделируются с помощью поверхностных мембран, как было описано в разделе 2.7.

В качестве материала первой фазы для первого численного эксперимента был выбран бериллий. Он является анизотропным материалом гексагональной сингонии. Матрица жесткостей в таком случае содержит пять различных компонент и имеет следующий вид:

$$c = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \end{bmatrix}.$$

Константы бериллия при нулевой пористости и температуре $T = 27^\circ\text{C}$ были приняты следующими:

$$c_{11} = 29.2 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2,$$

$$c_{12} = 2.7 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2,$$

$$c_{13} = 1.4 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2,$$

$$c_{33} = 33.6 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2,$$

$$c_{44} = 16.3 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2.$$

Ненулевые материальные константы второй фазы задавались соотношением: $c_{ij}^p = \eta c_{ij}$, где $\eta = 10^{-10}$, c_{ij} – компоненты матрицы жесткости материала первой фазы.

Физические характеристики мембранных элементов, моделирующих поверхностный эффект, неизвестны. Поэтому согласно разделу 2.7 был введен коэффициент пропорциональности k_{SS} , связывающий основные константы мембранных и

объемных элементов, то есть $c_{ij}^m = k_{ss}c_{ij}$. В реальности поверхностный эффект возникает, когда размеры пористого композита соответствуют наномасштабу, следовательно, чем больше значение k_{ss} , тем меньше размер рассматриваемого материала. Зная характеристики двух фаз композита и мембран, расположенных на границах фаз, согласно изложенному ранее можно в результате конечно-элементных расчетов найти эффективные модули рассматриваемого представительного объема.

На первом этапе проводился поиск зависимостей эффективной жесткости наноразмерного композита от процента пористости P и коэффициента пропорциональности k_{ss} . Пористость P задавалась в пределах от 10% до 80% с шагом в 10%, а коэффициент k_{ss} принимал значения 0.001, 0.01, 0.1, 0.5 и 1. Вычисления проводились на трех типах представительных объемах различной связности: на двух моделях со связностью 3-3, рассмотренных в разделе 2.2 (прямой и обратный алгоритмы), и на модели со случайным распределением пор. Представительный объем равномерно разбивался конечными элементами таким образом, что количество элементов вдоль оси равно $d = 16$, а их общее количество равно $16^3 = 4096$. Такой выбор связан с некоторыми ограничениями в алгоритме построения модели со связностью 3-3 в программном комплексе ACELAN-COMPOS.

На рисунках 23-30 изображены графики зависимостей относительных модуля Юнга $r(E_i)$, модуля сдвига $r(G_{\alpha\beta})$ и коэффициента Пуассона $r(\nu_{\alpha\beta})$ от пористости. Здесь и далее относительные значения, полученные с помощью компьютерной модели, будем определять как отношение эффективного модуля к модулю исходного материала, то есть:

$$r(E_i) = \frac{E_i^{eff}}{E_i^f}, \quad (3.1.1)$$

$$r(G_{\alpha\beta}) = \frac{G_{\alpha\beta}^{eff}}{G_{\alpha\beta}^f}, \quad (3.1.2)$$

$$r(\nu_{ij}) = \frac{\nu_{ij}^{eff}}{\nu_{ij}^f}, \quad (3.1.3)$$

где E_i^{eff} , $G_{\alpha\beta}^{eff}$, ν_{ij}^{eff} – значения эффективных модулей пористого тела, а E_i^f , $G_{\alpha\beta}^f$, ν_{ij}^f – соответствующие значения этих же модулей для материала матрицы композита (т.е. для тела с нулевой пористостью).

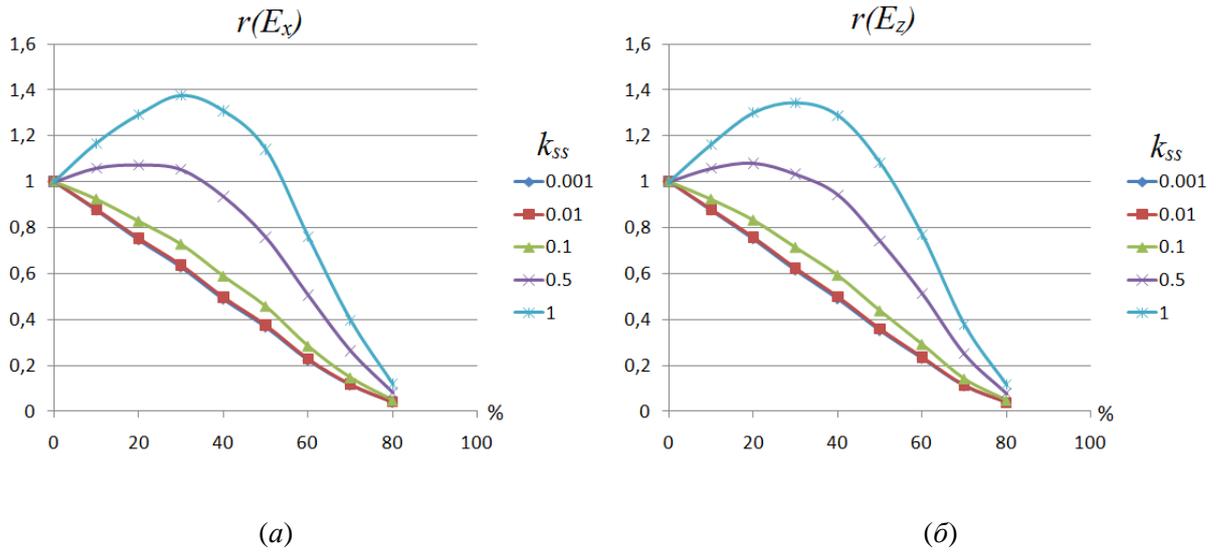


Рис. 23. Значения относительных модулей Юнга при случайном расположении пор: (а) – вдоль оси Ox , (б) – вдоль оси Oz

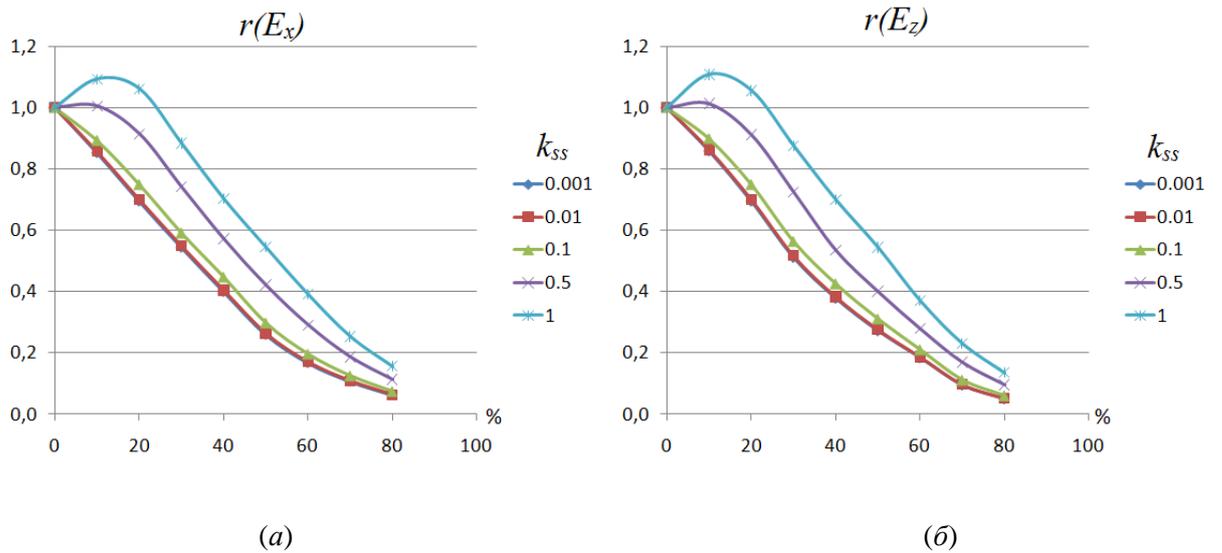


Рис. 24. Значения относительных модулей Юнга для композитов связности 3-3, полученные прямым алгоритмом: (а) – вдоль оси Ox , (б) – вдоль оси Oz

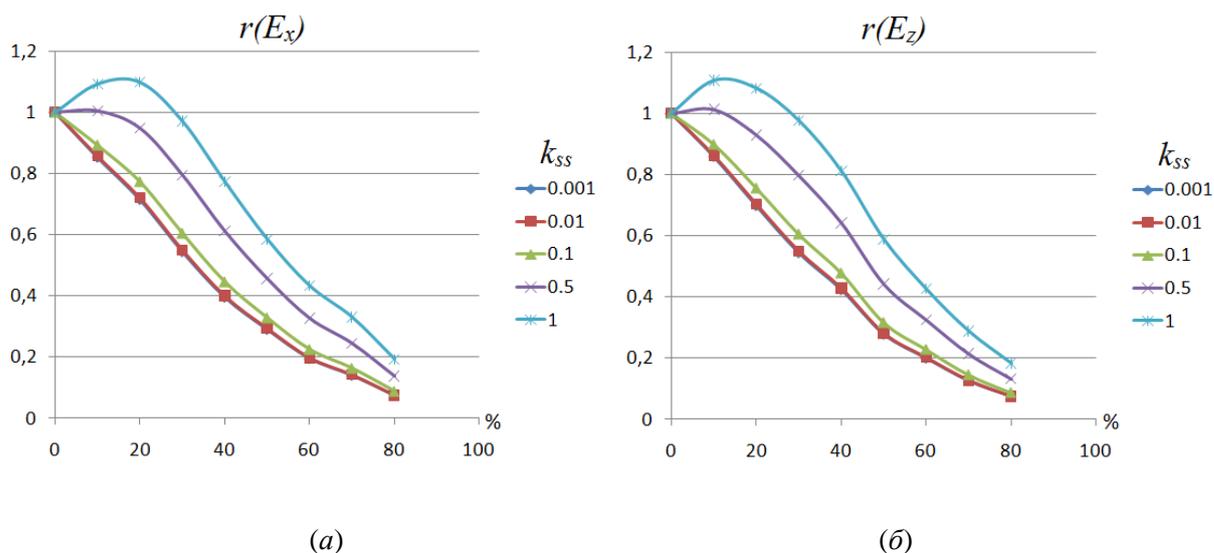


Рис. 25. Значения относительных модулей Юнга для композитов связности 3-3, полученные реверсивным алгоритмом: (а) – вдоль оси Ox , (б) – вдоль оси Oz

На рисунках 23-25 изображены графики пяти цветов, каждому из которых соответствует определенное значение коэффициента пропорциональности: $k_{SS} = 0.001$ – синий, $k_{SS} = 0.01$ – красный, $k_{SS} = 0.1$ – зеленый, $k_{SS} = 0.5$ – фиолетовый и $k_{SS} = 1$ – голубой. При малых значениях k_{SS} ($\leq 10^{-2}$) синие и красные кривые накладываются друг на друга, что говорит о незначительном влиянии поверхностных напряжений на мембранных элементах на эффективные свойства. Следовательно, можем считать, что при низких значениях коэффициента k_{SS} поверхностные эффекты не наблюдаются, и данная модель описывает поведение композита обычных размеров, особенно при $k_{SS} = 0.001$.

При значении коэффициента пропорциональности $k_{SS} = 0.1$ наблюдается небольшое отклонение зеленой линии от красной и синей. Следовательно, жесткость мембран на границах фаз уже влияет на эффективные свойства композита. Таким образом, при значениях коэффициента пропорциональности $k_{SS} \geq 0.1$ в построенной конечно-элементной модели проявляется поверхностный эффект, возникающий в пористых композитах в наноразмерных масштабах.

На интуитивном уровне достаточно очевидно, что материал с внутренней пористой структурой обладает меньшей жесткостью, чем материал с нулевой пористостью. Данное высказывание справедливо для тел обычных размеров. Но на наноуровне заметное влияние на эффективные свойства оказывают и поверхностные напряжения. На графиках 22-23 фиолетовая и голубая линии, соответствующие $k_{SS} = 0.5$ и $k_{SS} = 1$, при определенной пористости могут принимать значения выше единицы, то есть $r(E_i) > 1$. Данный результат демонстрирует, что при малой пористости наноразмерный материал может обладать не

только более высокой жесткостью по сравнению с аналогичным пористым макроразмерным материалом, но также даже превосходить значения жесткости сплошного материала. Этот факт известен для наноструктурированных пористых материалов, описываемых моделью Гуртина-Мурдоха ([74, 94], и др.)

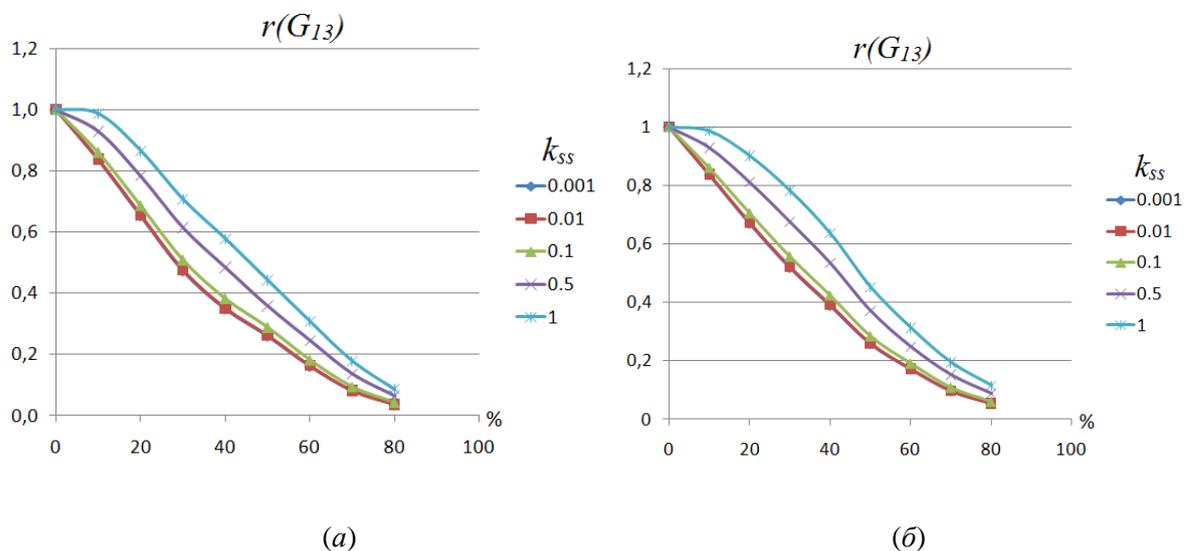


Рис. 26. Значения относительных модулей сдвига для композитов со связностью 3-3: (а) – полученные прямым алгоритмом, (б) – полученные реверсивным алгоритмом

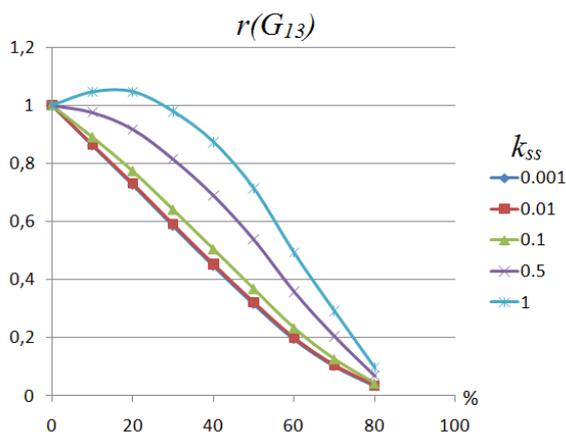


Рис. 27. Значения относительных модулей сдвига для композитов со случайным расположением пор

На рисунках 26-27 изображены графики зависимостей относительного модуля сдвига от пористости материала. Линии различных цветов аналогичным образом соответствуют результатам при различных значениях коэффициента пропорциональности k_{SS} . На данных графиках для модулей сдвига наблюдаются тенденции, схожие и для модулей Юнга, отмеченные ранее.

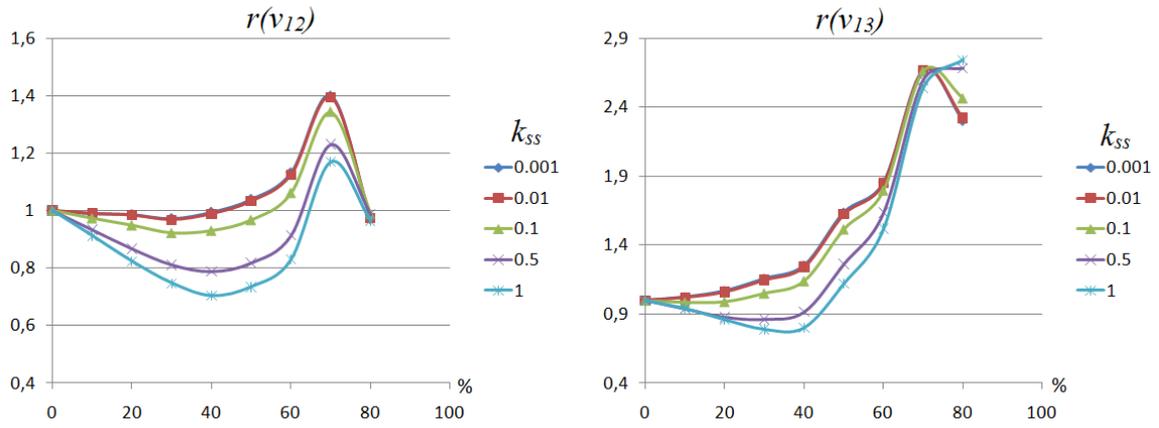


Рис. 28. Значения относительных коэффициентов Пуассона для композитов со случайным расположением пор

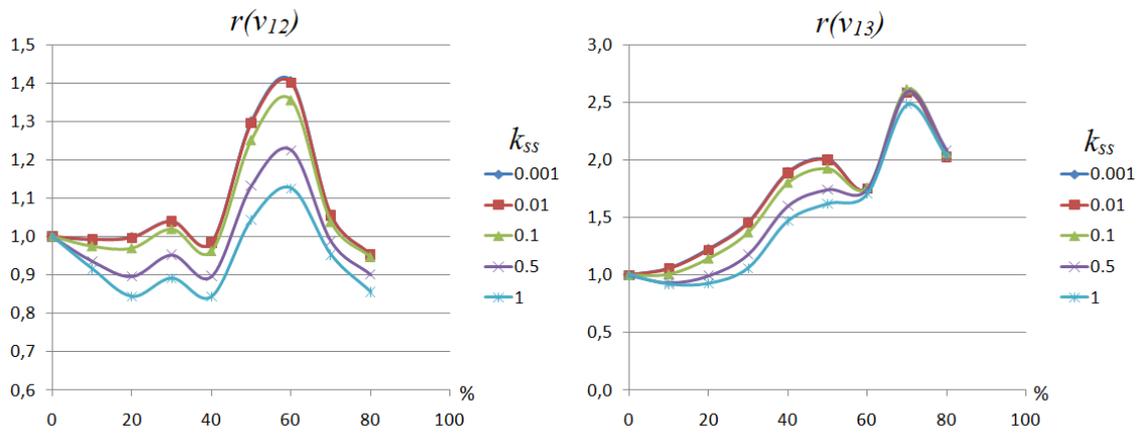


Рис. 29. Значения относительных коэффициентов Пуассона для композитов, построенных прямым алгоритмом связности 3-3

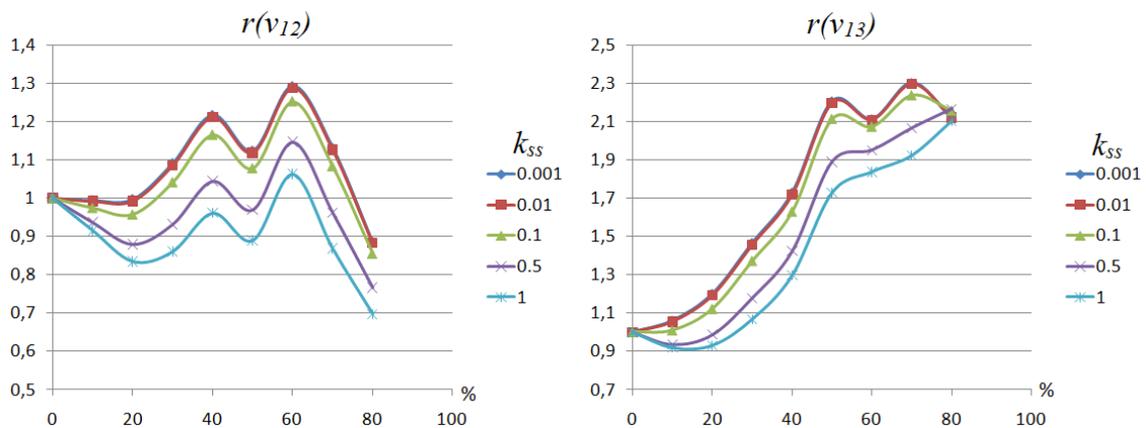


Рис. 30. Значения относительных коэффициентов Пуассона для композитов, построенных обратным алгоритмом связности 3-3

На рисунках 28-30 изображены графики зависимостей относительного коэффициента Пуассона от пористости материала для различных композитов. Линии различных цветов аналогичным образом соответствуют результатам при различных значениях коэффициента пропорциональности k_{SS} . Из данных графиков видно, что значения коэффициентов Пуассона ν_{12}^{eff} и ν_{13}^{eff} бериллия не обладают монотонностью. При изменении пористости может наблюдаться как незначительное убывание, так и довольно большой рост. Например, относительное значение $r(\nu_{13})$ для композитов с пористостью более 70% может достигать $r(\nu_{13}) = 2.5$ и даже выше.

Такое поведение коэффициентов Пуассона не характерно для других материалов, например, для кремния [107]. Необычные результаты для нанопористого бериллия можно объяснить тем, что их исходные значения крайне малы: $\nu_{12} = 0.09$ и $\nu_{13} = 0.04$. В связи с этим изменения больших значений модулей жесткости суммарно могут давать различные эффекты для коэффициентов Пуассона, которые в итоге оказываются, тем не менее, достаточно малыми. Кроме того, погрешности вычислений малых значений коэффициентов Пуассона, очевидно, больше погрешностей определения модулей жесткости.

Из анализа графиков, приведенных на рисунках 23-30, можно сделать вывод, что пористость и поверхностные эффекты оказывают противоположное влияние на эффективные жесткости: простой рост пористости приводит к уменьшению модулей жесткости, а поверхностные эффекты, наоборот, увеличивают их.

Далее на основе проведенных вычислений определим влияние распределения пор композита на эффективные модули. Выберем коэффициент пропорциональности $k_{SS} = 0.5$, так как при данном значении поверхностные эффекты проявляются достаточно явно. Обратим внимание на то, что поверхностные эффекты проявляются в наноразмерных масштабах. Представленная нами модель является безразмерной, следовательно, можно определить закономерность коэффициента пропорциональности k_{SS} и реального размера представительного объема. Но целью данного численного эксперимента было подтверждение корректности общей компьютерной модели, а также нахождение влияния мембранных элементов на эффективные свойства. Поэтому в данном разделе такая закономерность не анализировалась. Определение функции, связывающей k_{SS} с реальными физическими размерами представительного объема, описано в разделе 2.7. Заметим, что полученная закономерность (2.7.1) справедлива только для частного случая, когда в качестве представительного объема рассматривается ячейка Гибсона-Эшби.

Построим графики зависимостей относительных эффективных модулей от пористости при $k_{ss} = 0.5$. На одной координатной плоскости изобразим несколько графиков, соответствующих разным типам связности, чтобы продемонстрировать разницу во влиянии поверхностных эффектов от структуры композита.

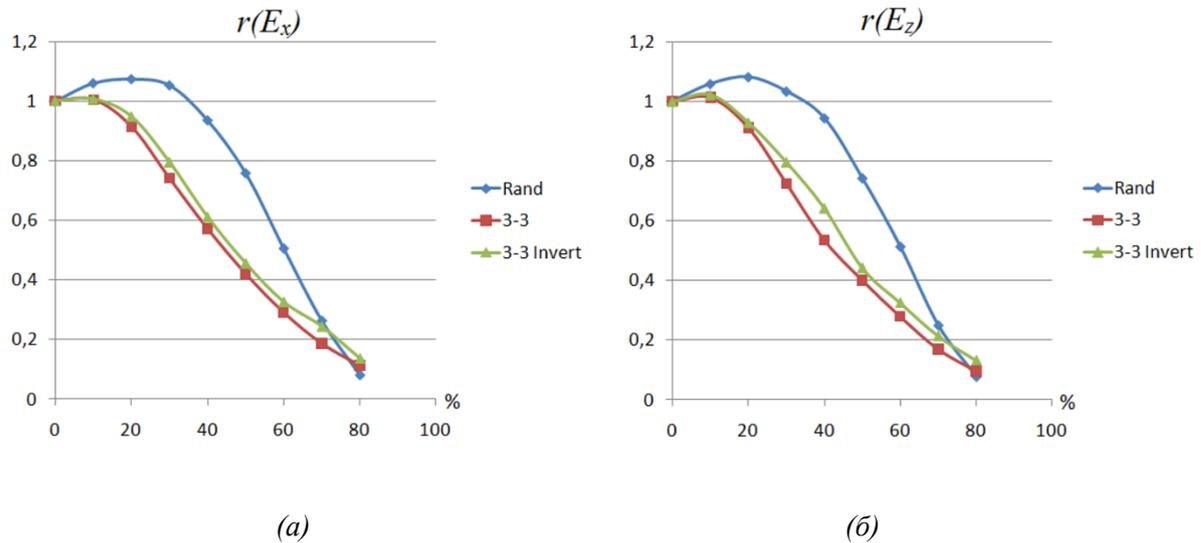


Рис. 31. Значения относительных модулей Юнга для пористых композитов с различной структурой: (а) – $r(E_x)$ и (б) – $r(E_z)$

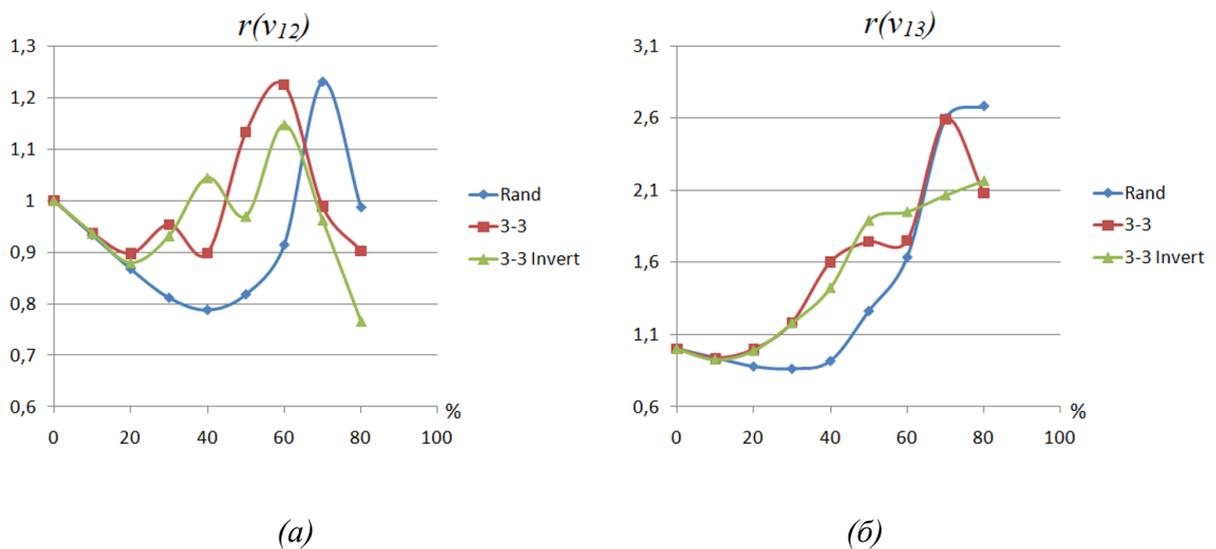


Рис. 32. Значения относительных коэффициентов Пуассона для пористых композитов с различной структурой: (а) – $r(v_{12})$ и (б) – $r(v_{13})$

На рисунках 31 и 32 изображены графики, полученные при расчетах композитов трех типов: синяя линия соответствует композиту со случайным распределением пор, красная – композиту, полученному по прямому алгоритму 3-3, а зеленая – композиту, полученному обратным алгоритмом 3-3.

Обратим внимание, что на рисунках 31 (а), (б) красная и зеленая кривые имеют схожее поведение, но синяя кривая, соответствующая композитам со случайной структурой пористости, заметно выделяется, так как имеет большие относительные значения.

Данный эффект можно объяснить следующим образом. Композиты, построенные прямым и обратным алгоритмом связности 3-3 обладают меньшей площадью поверхности пор, чем аналогичные композиты с произвольной структурой. Это происходит из-за требования связности второй фазы. Следовательно, площадь мембран, расположенных на границе двух фаз, также меньше. Например, при проведении отдельных вычислительных экспериментов было получено, что отношение площади поверхности пор к площади боковых сторон представительного объема $r(S)$ для композита (с пористостью 30%) со случайным распределением $r(S) = 3.145$, а для композита со связностью 3-3 $r(S) = 1.737$. Таким образом, при данных расчетах мембран с заданными поверхностными напряжениями в модели со случайным распределением пор оказалось примерно в 1.8 раз больше.

В алгоритме 3-3 и, соответственно, обратном ему для сохранения связности обеих фаз размеры пор могут быть большими и преобладать в какой-то определенной области представительного объема. С другой стороны, при произвольном случайном распределении связность пор не поддерживается, поэтому поры обычно генерируются почти равномерно по всей области тела, не часто объединяются друг с другом по общим граням, и поэтому они имеют небольшие размеры и их большое число.

Таким образом, можно сделать вывод, что при одинаковом проценте пористости композит, в котором размеры отдельных пор меньше, будет иметь большие эффективные модули жесткости, чем композит, в котором количество пор меньше, а их размеры больше. Теоретическое описание данного эффекта для другого примера пористого нанокompозита было приведено ранее в работе [94].

На рисунке 32 представлены значения относительных коэффициентов Пуассона при различных типах связности. Как уже отмечалось ранее, поведение коэффициентов Пуассона бериллия при увеличении пористости не имеет монотонности. Более того, кривые, описывающие композиты со связностью 3-3, имеют большее число точек перегиба, чем композиты с произвольным распределением пор. Данный эффект можно объяснить следующим образом. Из-за требования связности обеих фаз, поры могут сосредотачиваться в определенных областях композита, тем самым создавая материал с низкой пористостью в одной части и большими пустотами в другой.

Необходимо подчеркнуть, что представленная компьютерная модель для композита с пористостью, генерируемой простым случайным алгоритмом, не контролирует связность первой фазы, так как поры распределяются случайно. Поэтому можно предполагать, что при моделировании высокопористых материалов в отдельных случаях могут наблюдаться существенные ошибки. В связи с этим, если при моделировании представительного объема обнаруживалось, что связность первой фазы нарушалась, то численный эксперимент повторялся заново.

3.2. Численные эксперименты для базовой ячейки при различной пористости. Сравнение с аналитической моделью Гибсона-Эшби

В вычислительных экспериментах, описанных в данном разделе, в качестве материальных свойств модели были взяты модули нержавеющей стали 316L. Данный материал является изотропным и имеет следующие материальные константы [12]: модуль Юнга $E_f = 187$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu_f = 0,3$. Расчеты проводились при различной пористости P , которая варьировалась при задании толщины балок h . Для базовой решетки были проведены численные эксперименты при варьировании пористости P от 5 до 95%.

Для верификации разработанной конечно-элементной модели проводилось сравнение численных результатов с результатами, полученными по аналитической формуле Гибсона-Эшби. Согласно одной из моделей Гибсона-Эшби для изотропного упругого материала, относительное значение модуля Юнга равно квадрату массовой доли материала, умноженному на некоторый коэффициент. Для открытых ячеек Гибсона-Эшби при преобладающих деформациях растяжения-сжатия этот коэффициент можно принять за единицу, и формулу для относительного модуля Юнга можно представить в виде [2, 18–23]:

$$r(E^{GA}) = \frac{E^{GA}}{E_f} = \left(\frac{\rho^{GA}}{\rho_s} \right)^2 = (1 - p)^2. \quad (3.2.1)$$

На рисунке 33 изображены графики зависимостей относительного модуля Юнга от пористости $r(E) = E^{eff}/E_f$. Зеленая линия здесь соответствует значениям относительного модуля Юнга для модели Гибсона-Эшби, рассчитанным по формуле (3.2.1). Желтая, красная и синяя линии соответствуют значениям, полученным численными экспериментами в ANSYS из решений задач гомогенизации (1.4.1) – (1.4.12) в V_f . Желтая

линия построена на основе результатов конечно-элементного моделирования одной ячейки, красная линия – на основе регулярной решетки, составленной из $3 \times 3 \times 3$ ячеек Гибсона–Эшби, а синяя линия – на основе регулярной решетки, составленной из $5 \times 5 \times 5$ ячеек.

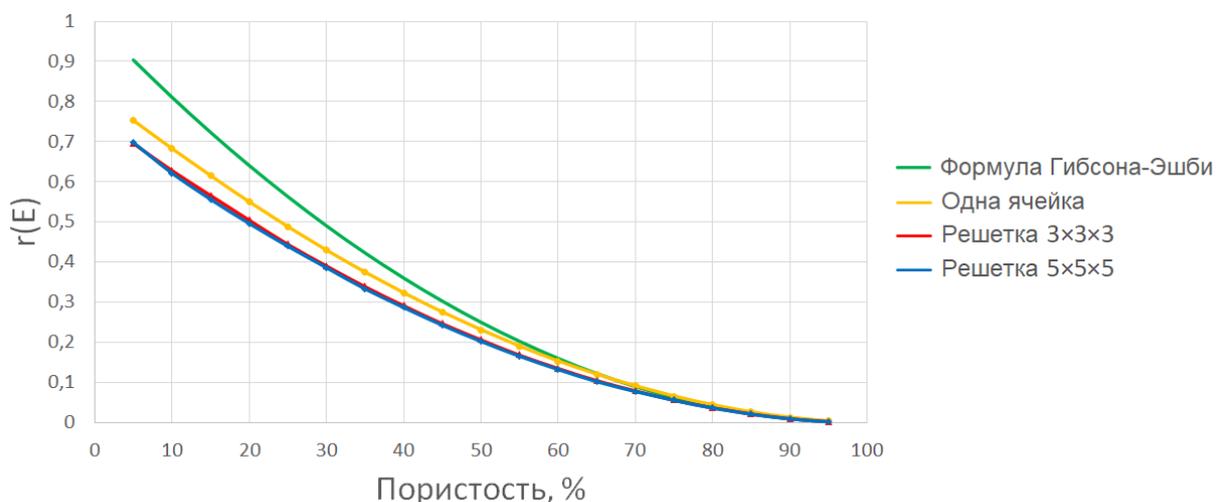


Рис. 33. Зависимости относительного модуля Юнга ячейки Гибсона-Эшби и двух регулярных решеток от пористости, полученные аналитически и численно

Из графиков, приведенных на рис. 33, видно, что формула (3.2.1) дает значения, близкие к значениям, вычисленным в ANSYS, но только при пористости выше 75%. Данное отклонение объясняется тем, что аналитическая модель Гибсона-Эшби основана на задаче о прогибе балки, и поэтому формула (3.2.1) справедлива только для ячеек, длина ребер которых значительно больше, чем толщина. Следовательно, аналитическая модель справедлива только для оценки эффективных свойств высокопористых или пенообразных материалов с большим процентом пористости.

Также из всех приведенных графиков можно заметить, что численные результаты для единичной ячейки (желтые линии) достаточно существенно отличаются от полученных значений для регулярных массивов ячеек (красные и синие линии). А именно, при одинаковой пористости эффективный модуль Юнга единичной ячейки больше, чем соответствующие упругие модули решеток.

3.3. Численные эксперименты для регулярных и нерегулярных решеток

В следующих численных экспериментах для задания механических свойств материала, заполняющего объем V_f использовалась нержавеющая сталь 316L, как изотропный упругий материал с модулем Юнга $E_f = 187$ ГПа и коэффициентом Пуассона

$\nu_f = 0,3$. В прошлом разделе было показано, что эффективные модули жесткости решетки $3 \times 3 \times 3$ имеют близкие значения с модулями решетки $5 \times 5 \times 5$. Но решетка $5 \times 5 \times 5$ имеет слишком много конечных элементов и, следовательно, численный эксперимент потребует значительных вычислительных мощностей и времени. Поэтому было решено численные эксперименты для нерегулярных решеток проводить на решетках $3 \times 3 \times 3$.

Отметим, что нерегулярная решетка генерируется случайным образом, поэтому невозможно перед экспериментом точно задать значение пористости. Таким образом, задавались толщины ребер h , соответствующие определенной пористости P от 65 до 95% для базовой ячейки Гибсона-Эшби, взятые из таблицы 1. При этом пористость решетки вычислялась после ее построения. Финальная пористость была близка к ожидаемой пористости, но не равна ей.

На рисунках 34 – 37 показаны зависимости относительного модуля Юнга $r(E)$, коэффициента Пуассона $r(\nu)$ и модулей жесткости $r(c_{11})$ и $r(c_{12})$ как для регулярных, так и для нерегулярных ячеистых решеток Гибсона-Эшби размера $3 \times 3 \times 3$ от пористости. Относительные значения вычисляются с помощью формул (3.1.1) – (3.1.3), определенных в разделе 3.1. Аналогичным образом вычисляются относительные модули жесткостей:

$$r(c_{\alpha\beta}) = \frac{c_{\alpha\beta}^{eff}}{c_{\alpha\beta}^f}, \quad (3.3.1)$$

где $c_{\alpha\beta}^{eff}$ – значения эффективных модулей жесткости пористого тела, а $c_{\alpha\beta}^f$ – соответствующие значения этих же модулей для материала матрицы композита (т.е. для тела с нулевой пористостью).

Более того, на рис. 34 также имеется зеленая кривая, соответствующая значениям относительных модулей Юнга, полученным по формуле (3.2.1). Синие кривые на рисунках 34 – 37 построены в соответствии со значениями, полученными для регулярных решеток; оранжевые области содержат значения, полученные для нерегулярных решеток с равномерным случайным распределением, а красные области – с нормальным распределением.

Следует отметить, что для нерегулярных решеток размеры ячеек выбирались случайным образом, и поэтому конечные результаты варьировались от эксперимента к эксперименту. Чтобы уменьшить влияние случайности, было выполнено десять вычислений для каждой фиксированной толщины балки и осуществлялось дополнительное

усреднение коэффициентов матрицы эффективных упругих модулей до модулей изотропного материала.

Для дальнейшей обработки результатов использовались статистические методы с вычислением доверительных интервалов по следующей методологии [104]. Пусть w_1, w_2, \dots, w_n – значения для одной выборки относительных эффективных модулей с числом степеней свободы $f = n - 1$ при малом числе испытаний n . Тогда среднее арифметическое \bar{w} и выборочное стандартное отклонение s определялись в виде

$$\bar{w} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w_i, \quad (3.3.2)$$

$$s = \sqrt{\frac{1}{f} \sum_{i=1}^n (w_i - \bar{w})^2}, \quad (3.3.3)$$

а для расчета доверительного интервала $\Delta\bar{w}$ среднего значения \bar{w} при t -распределении $t(P, f)$ с доверительной вероятностью P использовалась формула

$$\Delta\bar{w} = \frac{t(P, f)s}{\sqrt{n}}, \quad (3.3.4)$$

с критическим значением t -критерия Стьюдента $t(P, f) = 2,78$ при $P = 0,95$, $n = 5$, найденным из таблицы А.3 [104].

Проводя вычисления по (3.3.2) – (3.3.4) для значений $w_i(p)$, можно построить зависимости от пористости p верхних и нижних значений относительных эффективных модулей $\bar{w} \pm \Delta\bar{w}$ с доверительными интервалами $\Delta\bar{w}$. Сглаженные кривые красного и желтого цвета получены аппроксимацией значений доверительных интервалов. Они определяют на рисунках (34) – (37) границы областей, в которых с доверительной вероятностью 95% находятся значения эффективных модулей $\bar{w} \pm \Delta\bar{w}$ для нерегулярных решеток из ячеек Гибсона–Эшби.

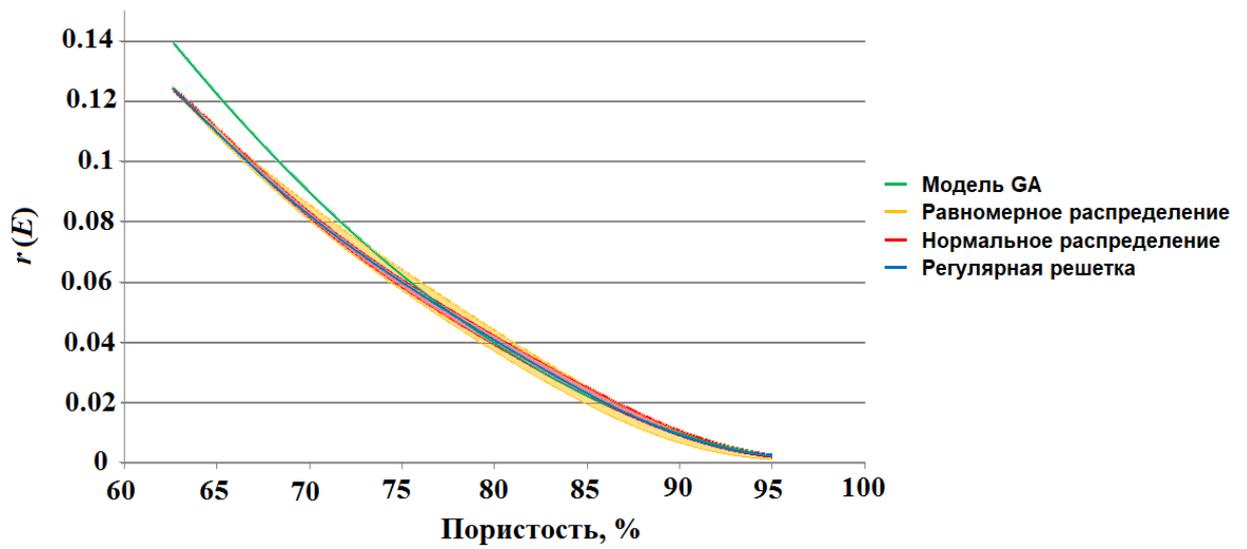


Рис. 34. Зависимости относительного модуля Юнга от пористости для модели Гибсона–Эшби и для регулярных и нерегулярных решеток

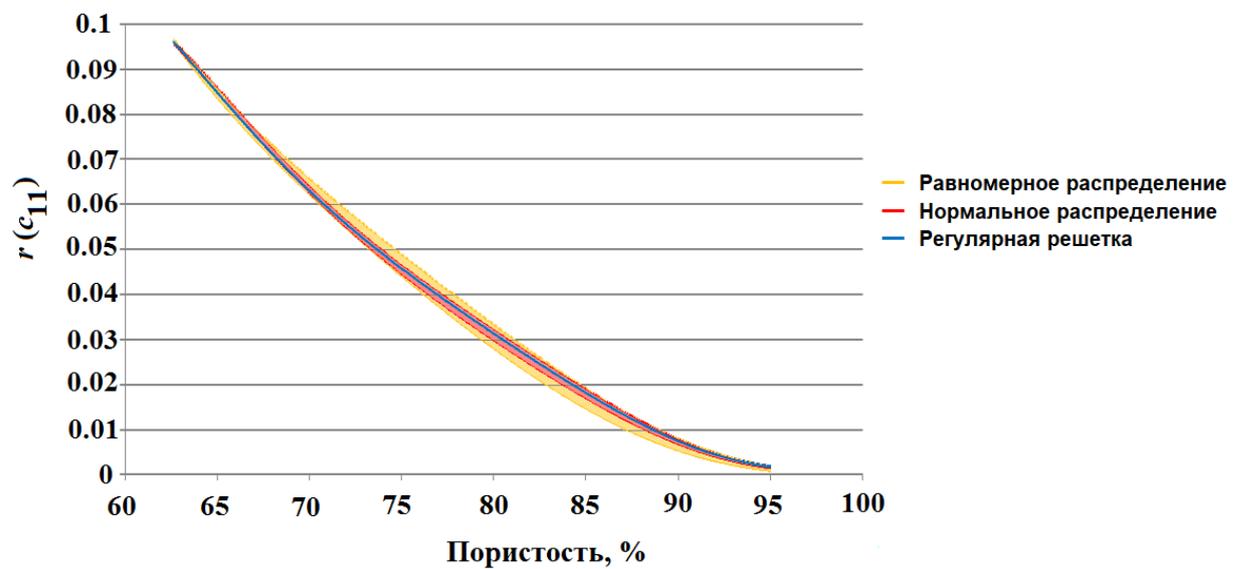


Рис. 35. Зависимости относительного модуля жесткости $r(c_{11})$ от пористости для регулярных и нерегулярных решеток

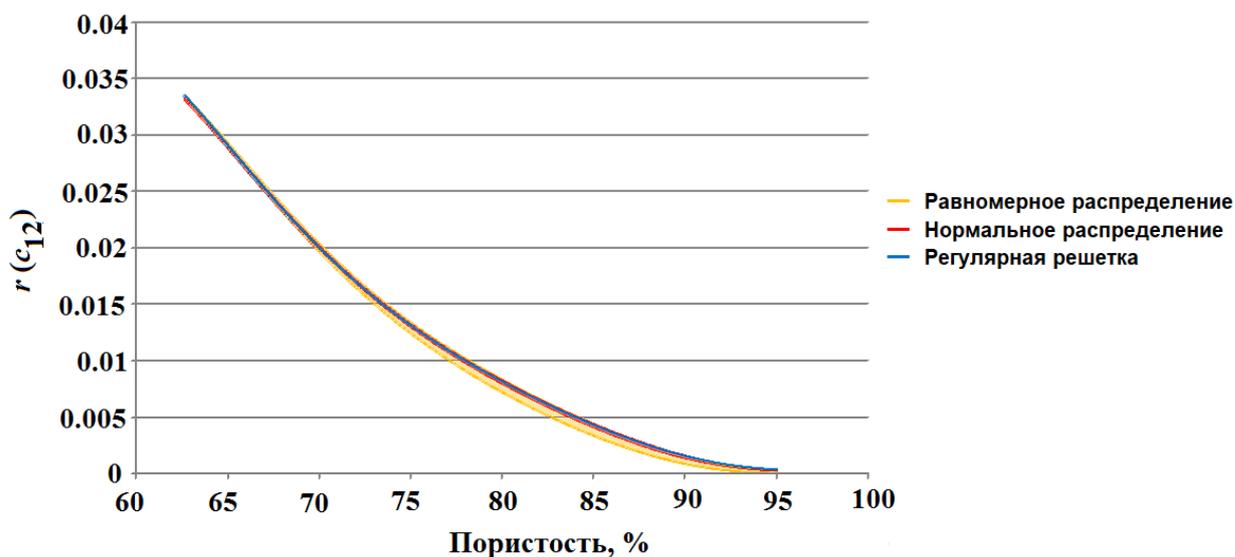


Рис. 36. Зависимости относительного модуля жесткости $r(c_{12})$ от пористости для регулярных и нерегулярных решеток

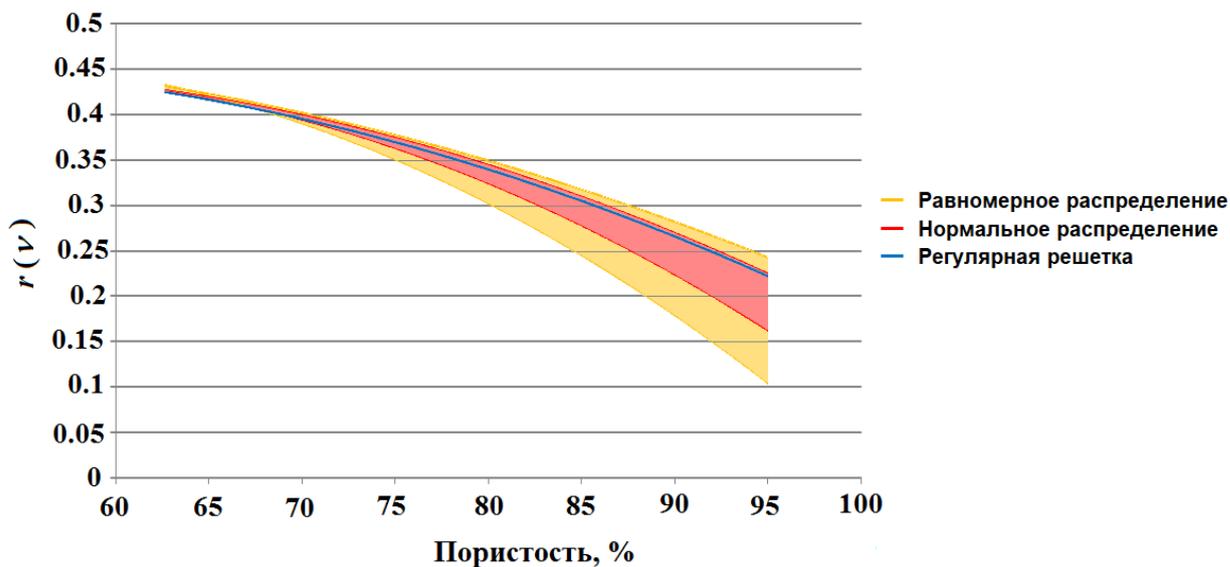


Рис. 37. Зависимости относительного коэффициента Пуассона $r(v)$ от пористости для регулярных и нерегулярных решеток

Из приведенных графиков видно, что значения, полученные для нерегулярных решеток, могут иметь достаточно большой разброс, особенно при равномерном распределении случайной величины (желтые области). Однако они сохраняют общую тенденцию и, за исключением значений относительных коэффициентов Пуассона, близки к значениям, полученным для регулярных решеток. Но, как известно [31, 46], эффективные коэффициенты Пуассона пористых материалов в большей степени зависят от микроструктуры. Таким образом, тенденции изменения коэффициентов Пуассона могут

зависеть не только от пористости, но и от внутренней структуры представительных объемов и, естественно, от коэффициентов Пуассона исходного сплошного материала.

Как отмечалось выше, нерегулярная решетка может не сохранять изотропные свойства твердого материала. Чтобы проанализировать это явление, были рассчитаны относительные отклонения эффективных модулей для композитов с нерегулярными решетками. Так были получены относительные отклонения модулей Юнга $\delta(E)$, относительные отклонения модулей жесткости $\delta(c_{\alpha\beta}, c_{\gamma\zeta})$ и относительные отклонения коэффициентов Пуассона $\delta(\nu)$. Данные значения были вычислены по формулам:

$$\delta(E) = \frac{|E_1^{eff} - E_3^{eff}|}{E_1^{eff}} \cdot 100\%, \quad (3.3.5)$$

$$\delta(c_{\alpha\beta}, c_{\gamma\zeta}) = \frac{|c_{\alpha\beta}^{eff} - c_{\gamma\zeta}^{eff}|}{c_{\alpha\beta}^{eff}} \cdot 100\%, \quad (3.3.6)$$

$$\delta(\nu) = \frac{|\nu_{12}^{eff} - \nu_{13}^{eff}|}{\nu_{12}^{eff}} \cdot 100\%. \quad (3.3.7)$$

На рисунке 38 показаны графики средних относительных отклонений для модулей жесткости c_{11} и c_{33} (синяя кривая), модулей c_{12} и c_{13} (зеленая кривая), модулей Юнга (красная кривая) и коэффициентов Пуассона (желтая кривая). Сплошные линии соответствуют нормальному распределению случайной величины. Пунктирные линии соответствуют равномерному распределению. Обратим внимание, что эти кривые являются аппроксимацией вычисленных отклонений для численных экспериментов. Также отметим, что зависимости от пористости относительных отклонений $\delta(c_{11}, c_{33})$ и $\delta(E)$ очень близки, и поэтому синяя кривая практически совпадает с красной.

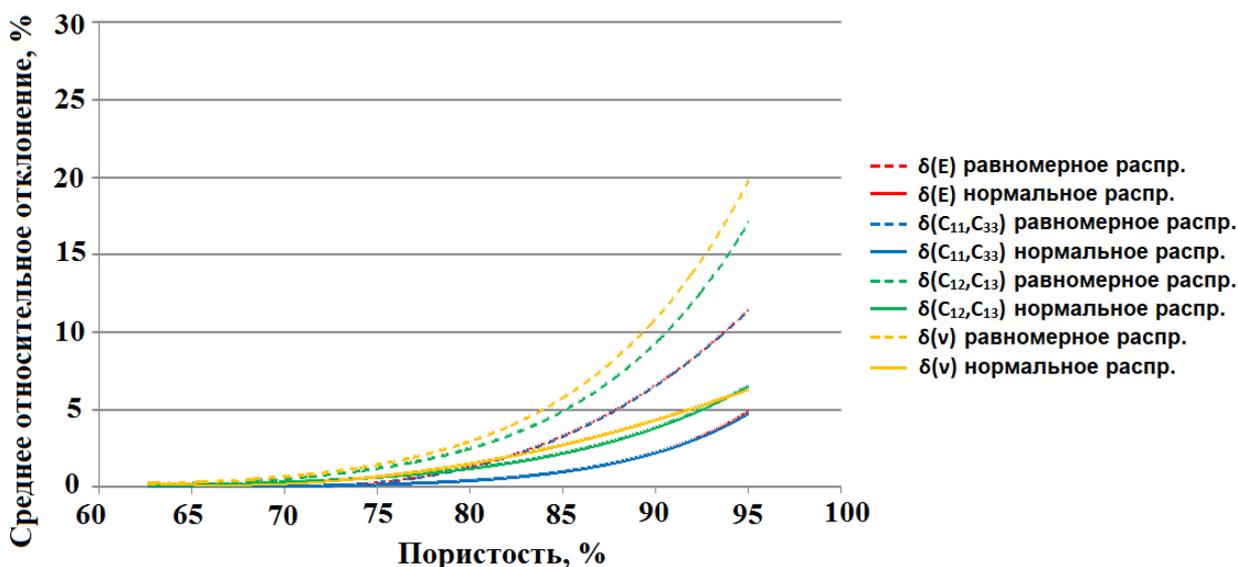


Рис. 38. Отклонения относительных модулей нерегулярных решеток, характеризующие анизотропию эффективного материала

Из рис. 38 можно отметить, что средние относительные отклонения не превышают 25%, однако их не усредненные значения в некоторых случаях могут быть значительно больше, особенно для очень высокопористых структур. Представленные результаты подтверждают утверждение о том, что пористые пенопласты с нерегулярной решеткой могут обладать значительными анизотропными свойствами, даже если материал их каркаса изотропен. Эта анизотропия вызвана асимметрией геометрии, которая может приводить к высоким напряжениям в нерегулярных решетках.

На рис. 39 показаны результаты расчетов двух задач гомогенизации для различных структур с нерегулярными решетками, в которых наблюдаются большие концентрации напряжений в ячейках вдоль одной оси. Обратим внимание, что каркасы этих ячеек имеют небольшие размеры относительно других ячеек. Чем меньше каркасы и длиннее их внешние соединительные ребра, тем большие напряжения наблюдаются на этих ребрах и вблизи данных ячеек [32, 33, 47].

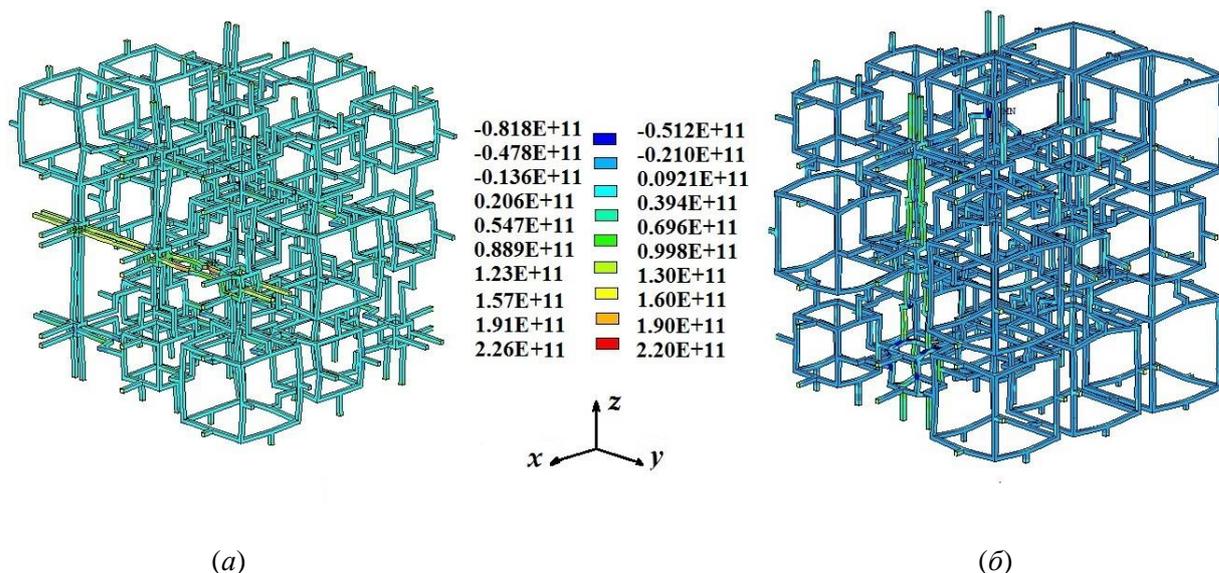


Рис. 39. Концентрация напряжения на соединительных ребрах при деформации вдоль оси Y (а) и оси Z (б)

Так, на рисунке 39 (а) изображено распределение y -компоненты напряжения $\sigma_{yy} = \sigma_{22}$ при растяжении вдоль оси Oy . Из данного рисунка видно, что непосредственно в части представительного объема, где имеются длинные внешние соединительные ребра и малые внутренние каркасы выстроены вдоль оси Oy , наблюдается наибольшее напряжение. Аналогичная тенденция видна на рисунке 39 (б), но, в отличие от рисунка 39 (а), на нем изображено распределение z -компоненты напряжения $\sigma_{zz} = \sigma_{33}$ при растяжении вдоль оси Oy другой нерегулярной решетки.

Отметим, что здесь представлены результаты для регулярных и нерегулярных решеток, составленных из трех ячеек Гибсона–Эшби вдоль каждой оси. При большем числе ячеек в регулярных и нерегулярных решетках статистически получаются более близкие результаты для эффективных упругих модулей, а эффекты концентрации напряжений нивелируются. Однако для отдельных вариантов сильно нерегулярных решеток эффективные модули по-прежнему могут принимать экстремальные значения.

Разработанные модели нерегулярных структур из ячеек Гибсона–Эшби могут использоваться в специализированном программном обеспечении для компьютерного дизайна пенообразных материалов, как в рамках приближений линейной теории упругости, так и для исследования их нелинейного поведения.

3.4. Численные эксперименты для ячеек с различной геометрической конфигурацией

Как и ранее, здесь численные эксперименты проводились для нержавеющей стали 316L – линейного изотропного упругого материала со следующими материальными константами [12]: модуль Юнга $E_f = 187$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu_f = 0.3$. В качестве объема V_f рассматривалась как единичная ячейка Гибсона-Эшби, так и регулярные сетки размера $3 \times 3 \times 3$ и $5 \times 5 \times 5$, составленные из таких ячеек.

Пористость P при расчетах варьировалась от 65% до 99% с шагом 5%. Как было упомянуто выше, на эффективные свойства пен, моделируемых решетками из ячеек Гибсона-Эшби, влияет не только пористость, но и геометрия структуры, а именно размер внутреннего каркаса a и толщины балок h . Для анализа этого влияния при фиксированной пористости проводилось три численных эксперимента. Рассматривались ячейки с минимально и с максимально возможными значениями толщины h . Также рассматривалась соответствующая классической модели Гибсона-Эшби [18] базовая ячейка, у которой размер внутреннего каркаса был равен половине полного размера $a = L/2$.

Результаты численных экспериментов приводятся, как и выше, в относительных величинах: относительный модуль Юнга $r(E)$, относительный модуль сдвига $r(G)$, относительные модули жесткости $r(c_{ij})$ и относительный коэффициент Пуассона $r(\nu)$. Данные величины были определены ранее по формулам (3.1.1) – (3.1.3) и (3.3.1).

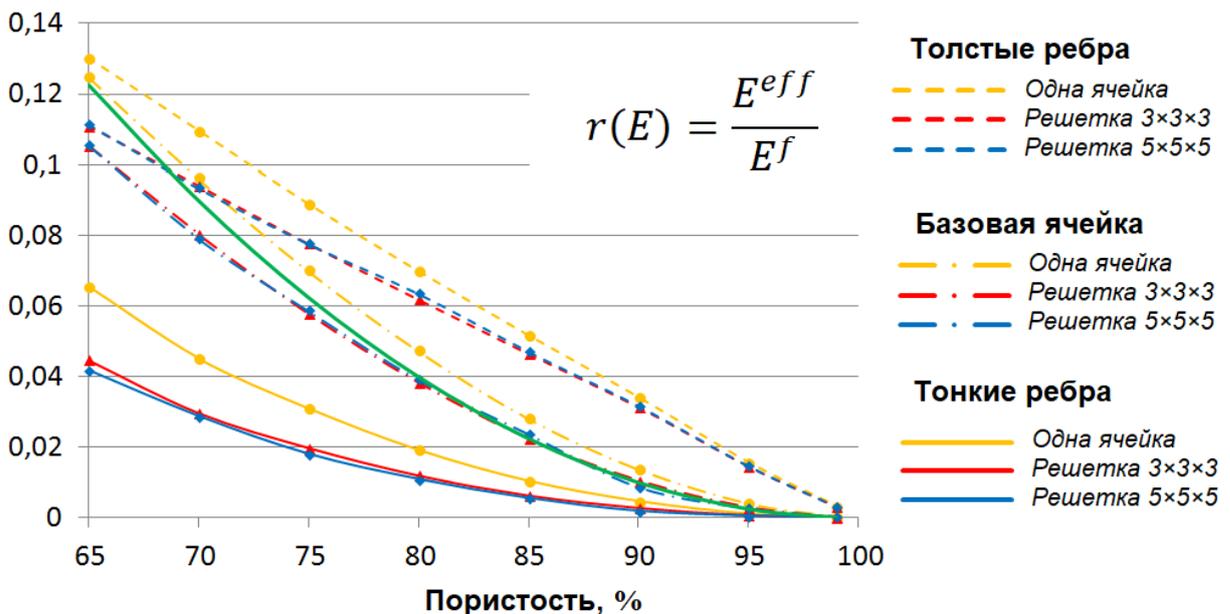


Рис. 40. Зависимости относительного модуля Юнга от пористости при различной конфигурации ячеек

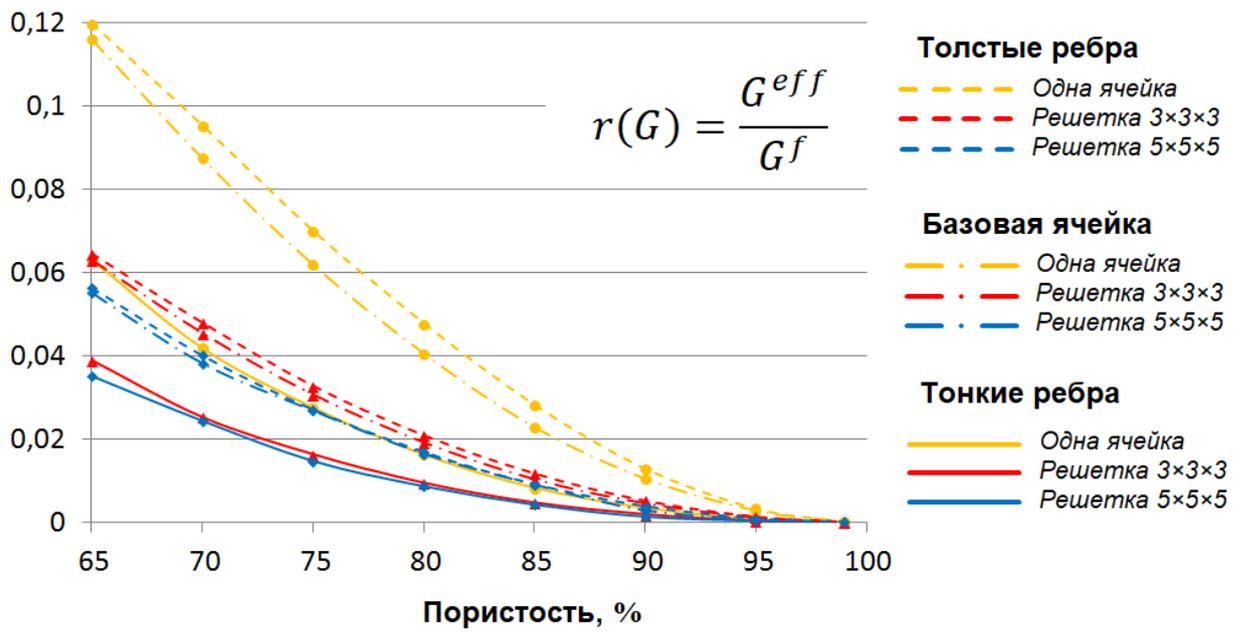


Рис. 41. Зависимости относительного модуля сдвига от пористости при различной конфигурации ячеек

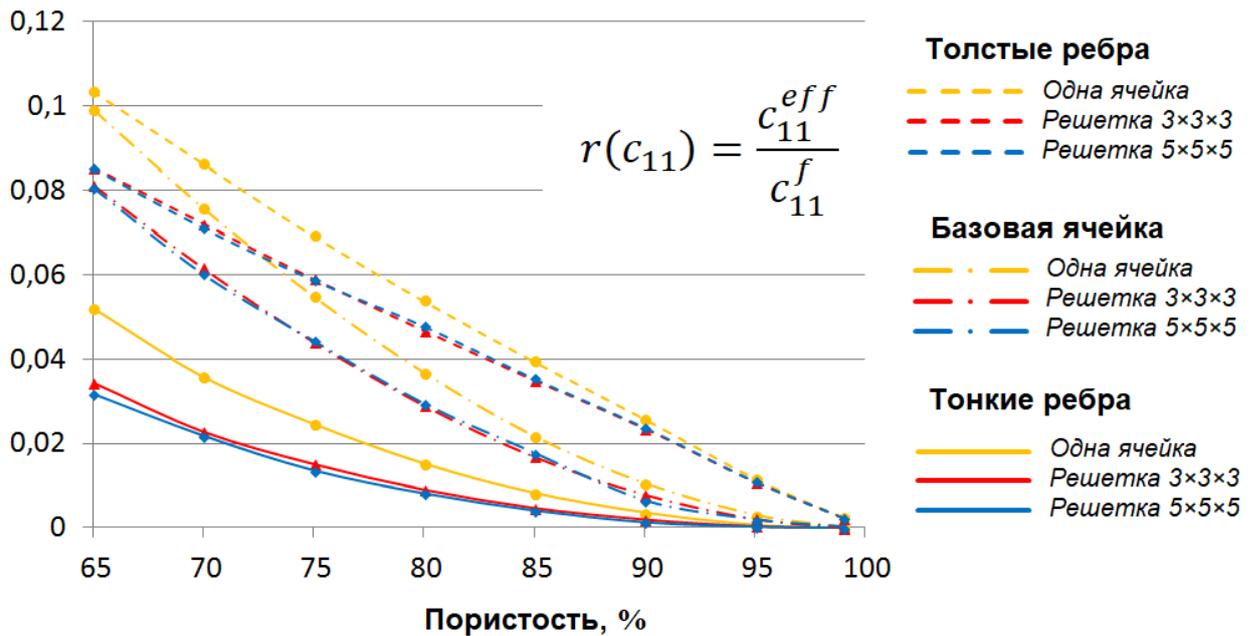


Рис. 42. Зависимости относительного модуля жесткости c_{11} от пористости при различной конфигурации ячеек

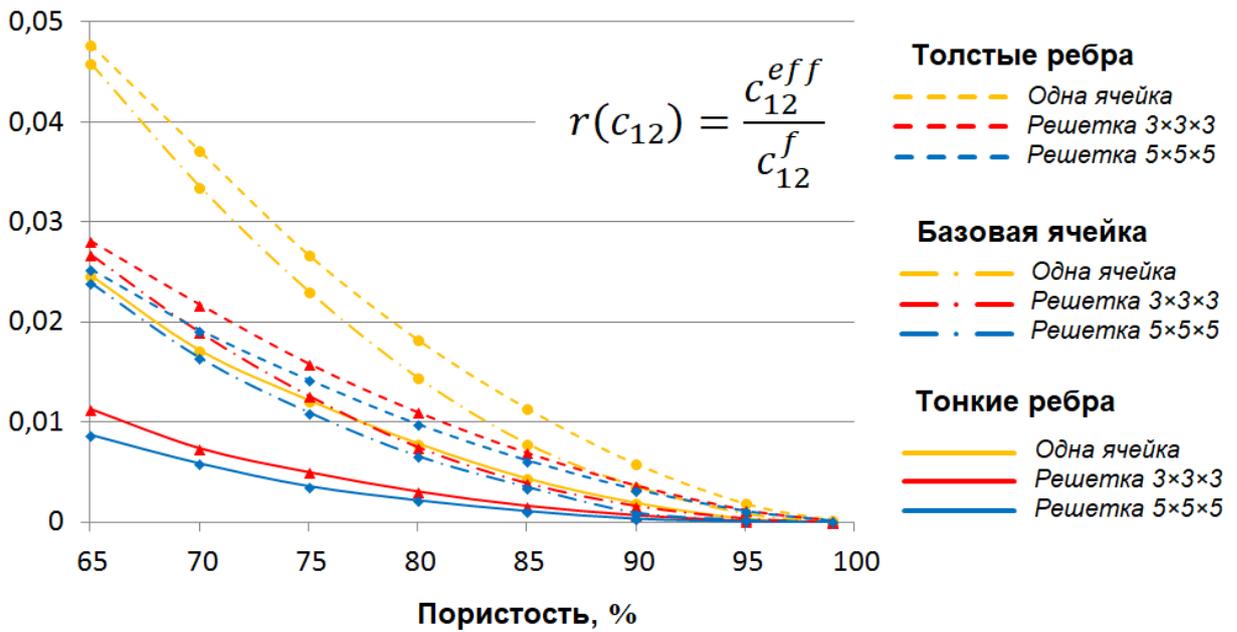


Рис. 43. Зависимости относительного модуля жесткости c_{12} от пористости при различной конфигурации ячеек

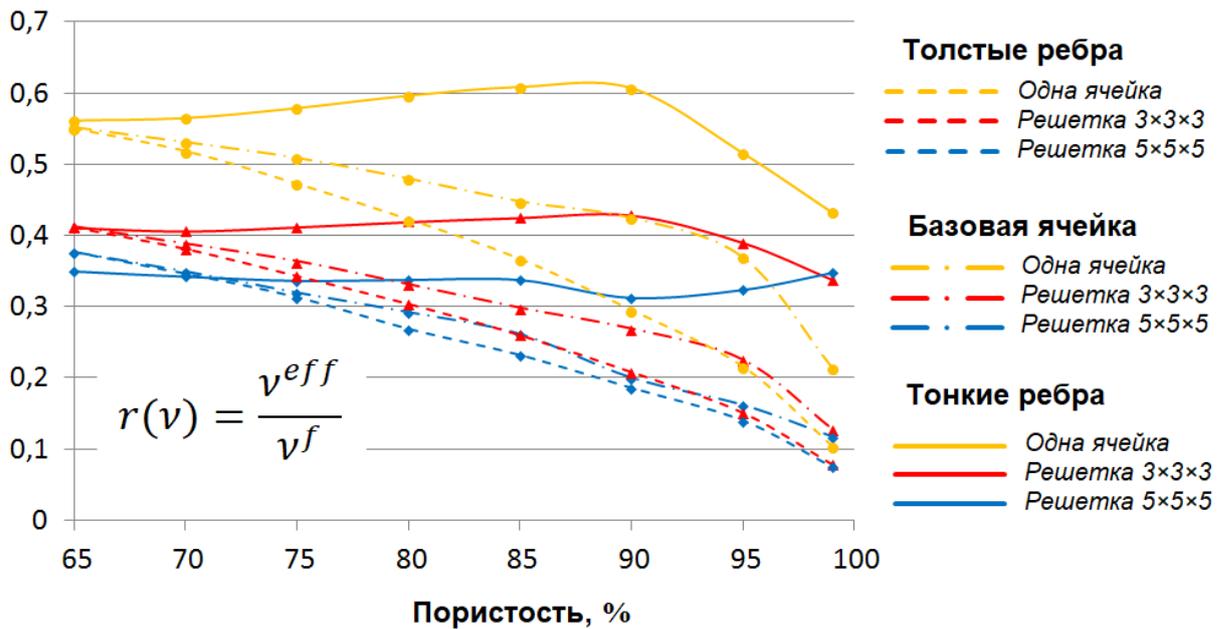


Рис. 44. Зависимости относительного коэффициента Пуассона от пористости при различной конфигурации ячеек

На рисунках 40 – 44 представлены графики зависимостей относительных упругих модулей от пористости. Желтые кривые построены по результатам, полученным для единичной ячейки, а красные и синие кривые построены для регулярных решеток размеров $3 \times 3 \times 3$ и $5 \times 5 \times 5$, соответственно. Также отметим, что на этих рисунках построены линии трех типов: сплошные кривые соответствуют ячейкам с самыми тонкими

возможными ребрами, пунктирные соответствуют ячейкам с самыми толстыми возможными ребрами, а штрихпунктирные соответствуют базовой ячейке Гибсона-Эшби. Кроме того, на рис. 40 изображена зеленая сплошная линия, которая соответствует значениям относительного модуля Юнга, полученного по классической формуле Гибсона-Эшби (3.2.1).

Из рис. 40 видно, что результаты, полученные по формуле Гибсона-Эшби (зеленая кривая) близки к результатам, вычисленным в ANSYS для базовых решеток (штрихпунктирные красная и синяя кривые) при пористости более 75%.

Другим важным результатом является то, что эффективные модули упругости зависят не только от пористости, как в формуле Гибсона-Эшби, но и от геометрической конфигурации самой ячейки. Так из рис. 40 – 44 видно, что при одинаковой пористости значения эффективных модулей могут значительно отличаться. Причем, при одинаковой пористости ячейка с более толстыми ребрами обладает большей жесткостью, чем ячейка с тонкими ребрами. Этот факт можно объяснить следующим образом. Сравним две ячейки с одинаковой пористостью, но разной толщиной ребер. Ячейка с более толстыми ребрами будет иметь меньший внутренний каркас, чем ячейка с более тонкими ребрами (рис. 16). Когда ячейка растягивается, например, вдоль оси Ox , то внешние ребра, направленные вдоль этой оси, будут деформироваться в продольном направлении, а внутренний каркас – изгибаться. Очевидно, что тонкие ребра легче сгибать. Это приводит к тому, что суммарные напряжения при растяжении ячейки с более тонкими ребрами будут меньше, чем суммарные напряжения в ячейке с более толстыми ребрами. Из рис. 45 видно, что напряжения в ячейке с толстыми ребрами и меньшим каркасом выше, что и подтверждает описанные ранее выводы.

Из графиков на рисунках 40 – 43 видно, что значения эффективных модулей жесткости сохраняют общие тенденции, однако поведение эффективного коэффициента Пуассона в зависимости от пористости отличается (рис. 44). Однако, как известно [31,56], эффективные коэффициенты Пуассона пористых структур наиболее существенно зависят от микроструктуры, и даже тенденции их изменения с пористостью могут меняться в зависимости от значений коэффициентов Пуассона соответствующих плотных материалов и их внутренней структуры.

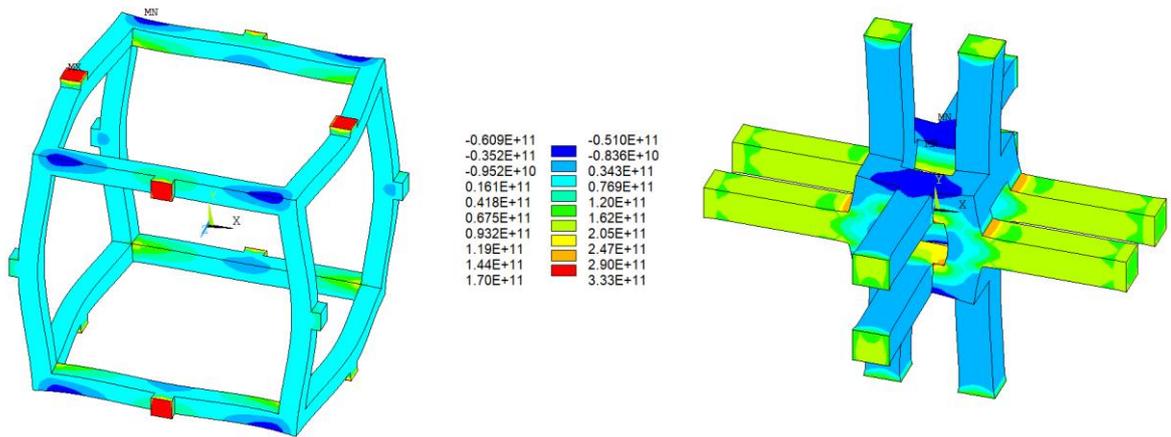


Рис. 45. Концентрация напряжения в ячейках с одинаковой пористостью 95% при деформации вдоль оси Ox : слева – тонкие ребра, справа – толстые ребра

Определив из решений задач гомогенизации все эффективные модули жесткости, можно оценить уровень анизотропии решетки, составленной из изотропного материала, используя коэффициент Зенера, вычисленного по формуле:

$$A = \frac{2c_{44}^{eff}}{c_{11}^{eff} - c_{12}^{eff}}. \quad (3.4.1)$$

Если этот коэффициент близок к единице, то рассматриваемую структуру можно считать изотропной. На рисунке 46 приведены графики зависимости коэффициента Зенера от пористости. Различные линии здесь (как на рис. 40 – 44) соответствуют различным конфигурациям ячейки Гибсона–Эшби и решеток, состоящих из таких ячеек. Как видно из рисунка 46, несмотря на изотропность исходного материала и регулярность решеток, коэффициент Зенера уменьшается с увеличением пористости. Это означает, что уровень анизотропии рассматриваемых структур возрастет, причем наиболее существенно для решеток с толстыми ребрами в ячейках. Это связано с геометрией самой ячейки, а именно с кубической формой внутреннего каркаса и с расположением соединительных балок на каркасе. Такая ячейка инвариантна относительно поворотов на 90° относительно главных осей, но не инвариантна относительно других поворотов.

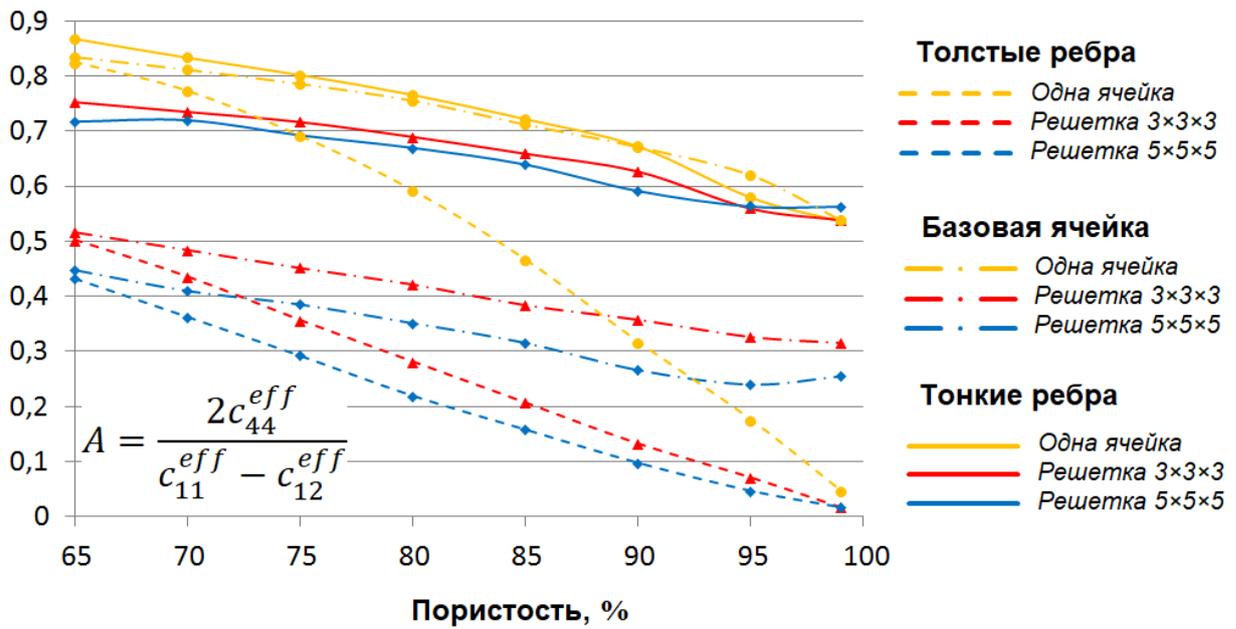


Рис. 46. Зависимости коэффициента Зенера от пористости при различной конфигурации ячеек

Из ранее приведенных графиков также можно заметить, что численные результаты для единичной ячейки (желтые линии) значительно отличаются от полученных значений для массивов ячеек (красные и синие линии). При одинаковой пористости и толщине балок эффективные модуль Юнга, модуль сдвига и модули жесткости единичной ячейки больше, чем соответственные упругие модули решеток.

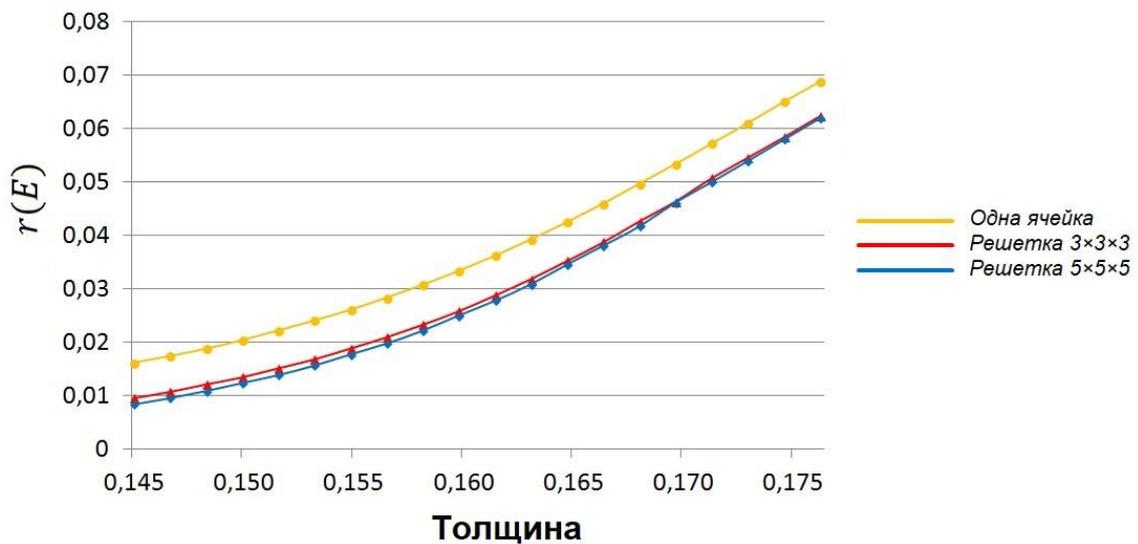


Рис. 47. Зависимости относительного модуля Юнга от толщины ребра ячейки при пористости 80%

На рисунке 47 изображены графики зависимости эффективных модулей Юнга от толщины ребра ячейки при фиксированной пористости $P = 80\%$. Из полученных результатов следует, что данная зависимость монотонна. С увеличением толщины ребра

увеличиваются и эффективные значения модуля Юнга. Кроме того, можно наблюдать, что при одинаковой пористости, но различной геометрической конфигурации ячейки, ее эффективные модули могут отличаться более, чем в пять раз.

3.5. Численные эксперименты для наноразмерных базовых ячеек

Рассмотрим описанные в разделе 1.4 статические задачи гомогенизации о сжатии и изгибе представительного объема, составленного из наноразмерных ячеек Гибсона-Эшби с поверхностными напряжениями. В данном эксперименте будем рассматривать базовые ячейки Гибсона-Эшби, то есть размер внутреннего каркаса ячеек равен $a = L/2$. В качестве материала для исследования было выбрано золото, как в работах [97, 98]. Физические характеристики этого изотропного материала примем следующими: модуль Юнга сплошного материала $E_f = 70$ (ГПа), коэффициент Пуассона $\nu_f = 0,42$.

Численные эксперименты проводились для единичной ячейки ($n_c = 1$) и для двух типов регулярных решеток ($n_c = 3$ и $n_c = 5$) при различной пористости. Коэффициент пропорциональности, который моделирует поверхностный эффект, варьировался от $k_{SS} = 0,0001$ до $k_{SS} = 0,1$. Данные значения соответствуют ячейкам с реальной толщиной ребер $h \approx 10$ (нм) и $h \approx 0,1$ (нм). Соответствия между коэффициентом пропорциональности и толщиной ребра получены с помощью формулы (2.4.1).

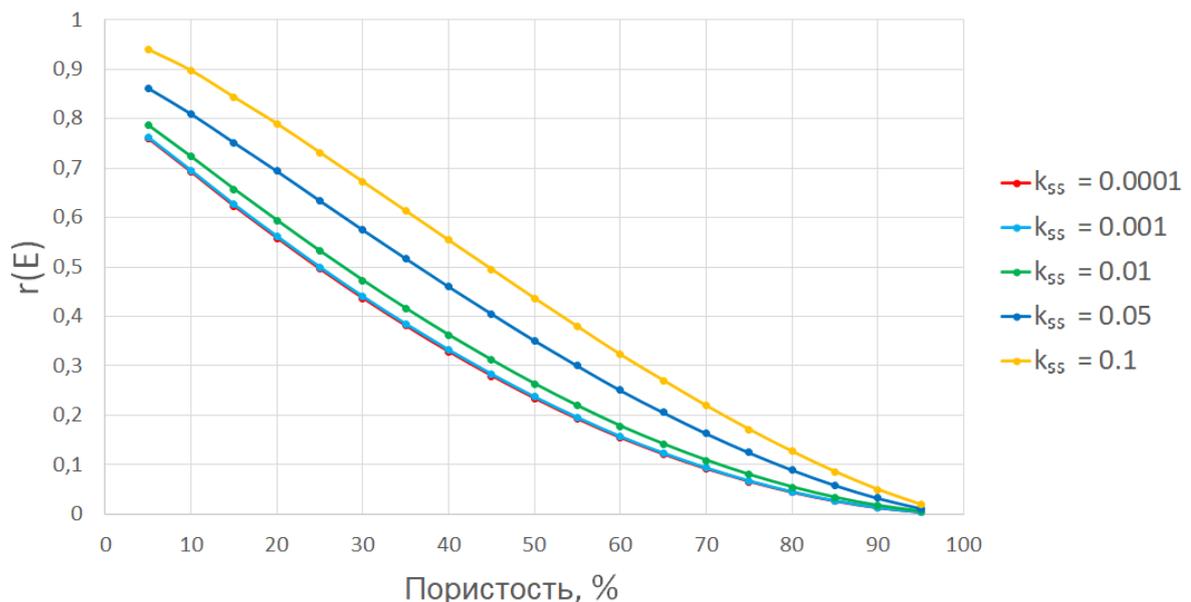


Рис. 48. Зависимости относительного модуля Юнга от пористости для одной ячейки при различных величинах поверхностных модулей k_{SS}

На рисунке 48 изображены графики зависимостей относительных эффективных модулей Юнга $r(E)$ от пористости для единичной ячейки при различных значениях k_{ss} . При $k_{ss} = 0,0001$ и $k_{ss} = 0,001$ (красная и голубая линии) графики практически не отличаются друг от друга. В этих случаях поверхностные эффекты настолько малы, что не влияют на эффективные свойства материала и, следовательно, результаты схожи с результатами для макроматериалов. При коэффициенте пропорциональности от $k_{ss} = 0,01$ (зеленая линия), что соответствует $h \approx 1$ (нм), поверхностный эффект уже начинает проявляться. При $k_{ss} = 0,05$ (синяя линия), и особенно, при $k_{ss} = 0,1$ (желтая линия) влияние поверхностных напряжений становится существенным. Так, при $k_{ss} = 0,1$ и пористости 30% относительный эффективный модуль Юнга нанопористого материала превышает соответствующий относительный эффективный модуль Юнга макроразмерного материала более, чем на 50 %.

На рисунках 49 – 53 показаны графики зависимостей относительных эффективных модулей от пористости как для единичной ячейки, так и для двух типов решеток. Сплошные линии соответствуют вычислениям при коэффициенте пропорциональности $k_{ss} = 0,0001$, пунктирные – вычислениям при $k_{ss} = 0,1$. Также на рисунке 49 приведена зеленая кривая, полученная из аналитической приближенной формулы Гибсона-Эшби (3.2.1). Желтые линии на рисунках 49 – 53 соответствуют эффективным модулям единичной ячейки, красные – решетке $3 \times 3 \times 3$, синие – решетке $5 \times 5 \times 5$.

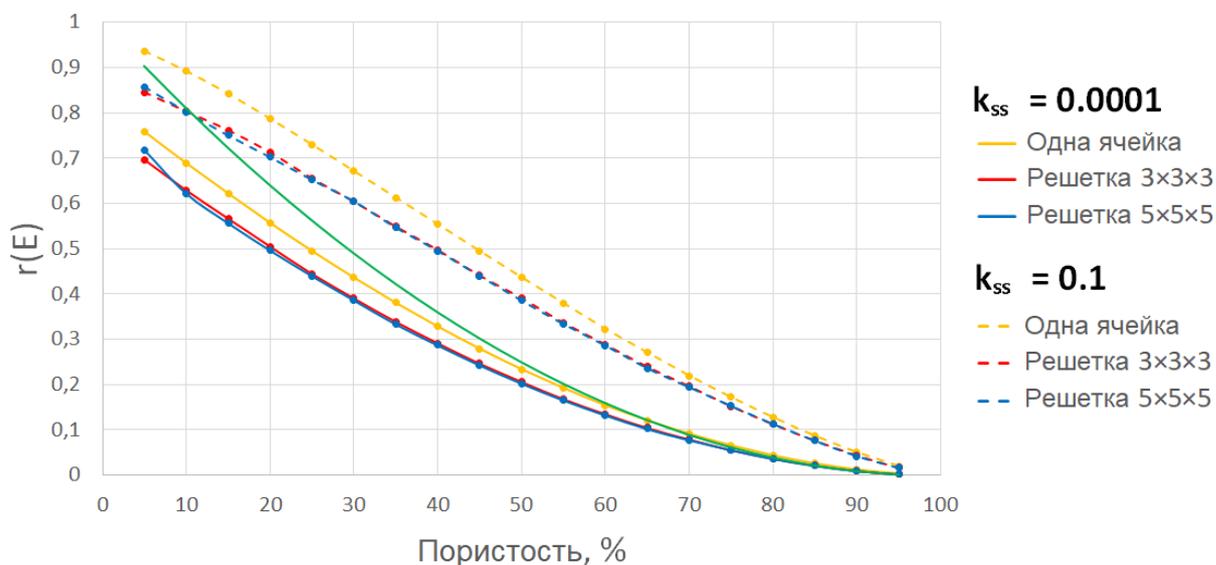


Рис. 49. Зависимости относительного модуля Юнга от пористости для одной ячейки и для двух типов решеток при малых и больших величинах поверхностных модулей

Обратим внимание на то, что эффективный модуль Юнга, полученный по формуле Гибсона-Эшби (рис. 49 – зеленая кривая), при пористости более 75% близок к результатам, полученным численно для моделей без поверхностных эффектов. Также заметим, что при одинаковой пористости эффективные модули единичной ячейки больше, чем соответствующие эффективные модули для решеток, особенно это касается сдвиговых модулей (рис. 52). Подобные результаты были отмечены ранее в других численных экспериментах и еще раз подтверждают вывод, что единичная ячейка не совсем корректно описывает эффективные свойства пенообразного материала при не слишком высокой пористости.

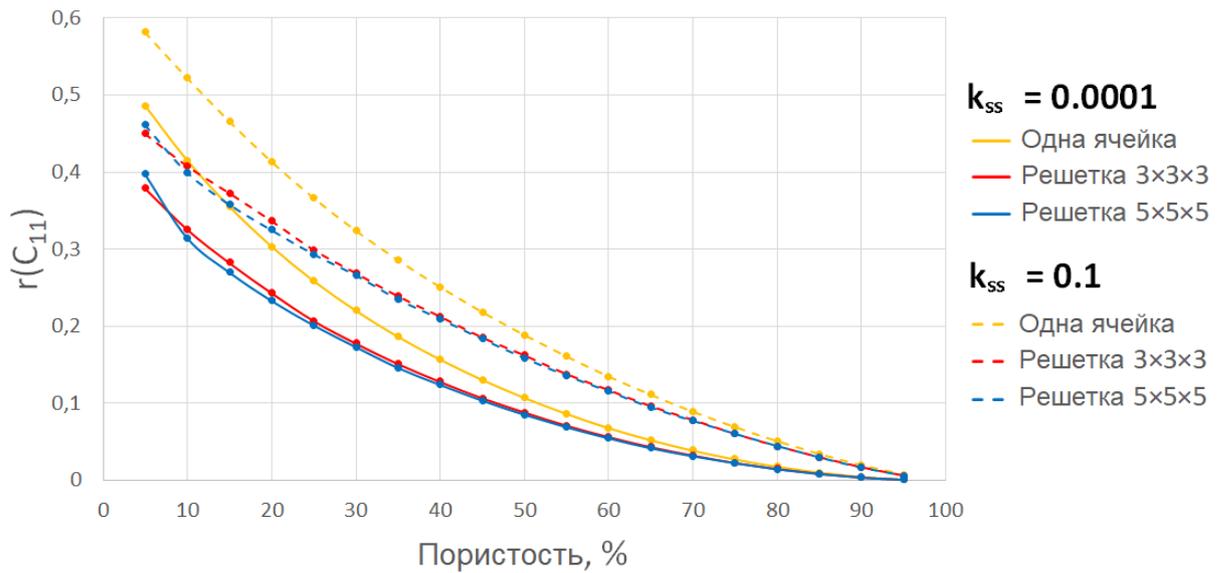


Рис. 50. Зависимости относительного эффективного модуля жесткости $r(c_{11})$ от пористости для одной ячейки и для двух типов решеток при малых и больших величинах поверхностных модулей

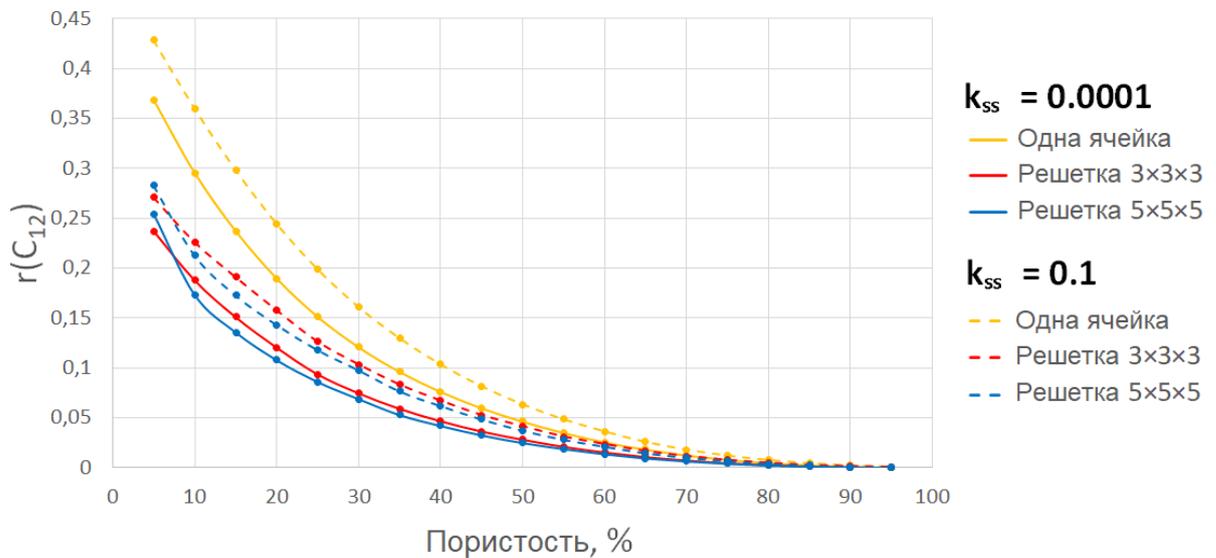


Рис. 51. Зависимости относительного эффективного модуля жесткости $r(c_{12})$ от пористости для одной ячейки и для двух типов решеток при малых и больших величинах поверхностных модулей

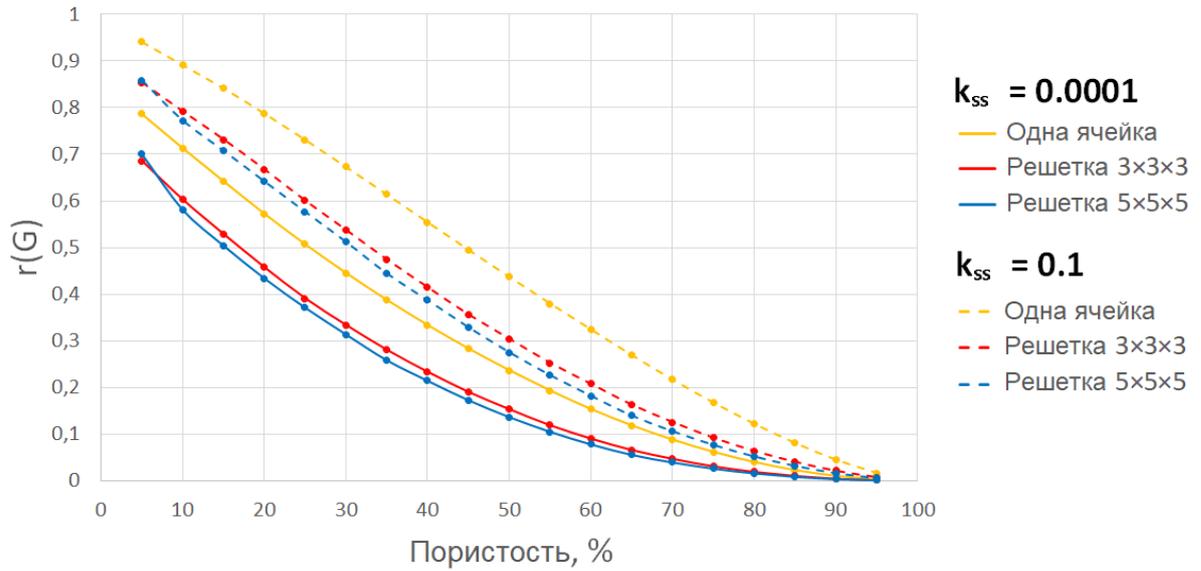


Рис. 52. Зависимости относительного эффективного модуля сдвига $r(G) = r(c_{44})$ от пористости для одной ячейки и для двух типов решеток при малых и больших величинах поверхностных модулей

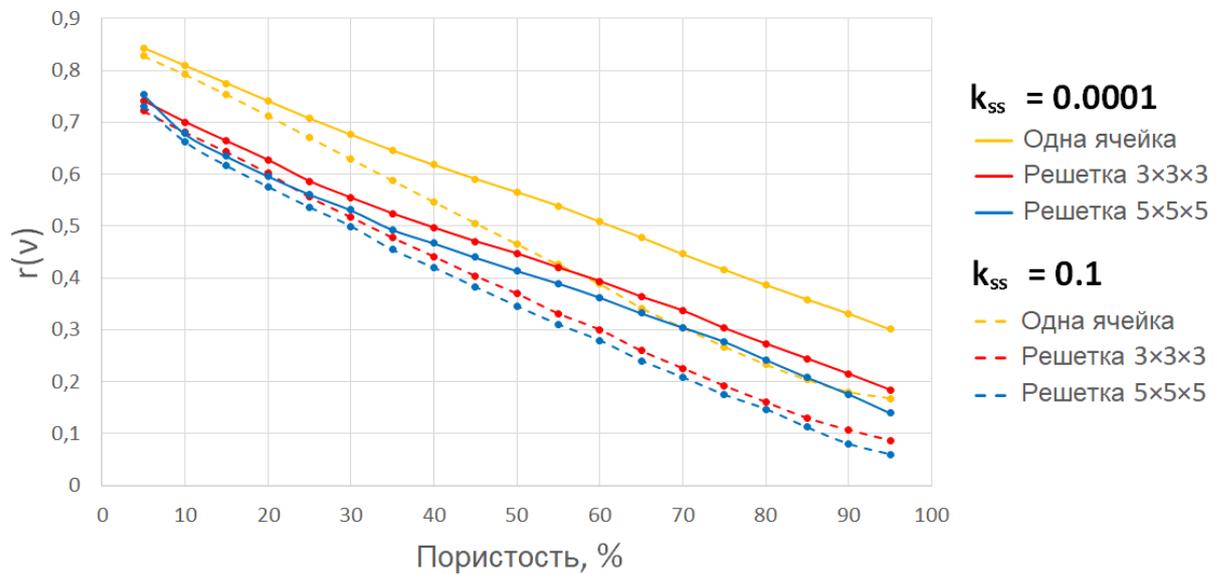


Рис. 53. Зависимости относительного эффективного коэффициента Пуассона $r(\nu)$ от пористости для одной ячейки и для двух типов решеток при малых и больших величинах поверхностных модулей

Из рисунков 49 – 53 также видно, что результаты для решеток $3 \times 3 \times 3$ и $5 \times 5 \times 5$ оказываются достаточно близкими между собой, причем как для макроразмерных, так и для

наноразмерных пен. Это позволяет использовать для анализа свойств более экономичную при численных расчетов решетку размера $3 \times 3 \times 3$.

Поверхностные эффекты могут существенно повысить эффективные модули жесткости или уменьшить коэффициент Пуассона, особенно при высокой пористости. Этот эффект возрастания модулей жесткости наноматериалов по сравнению с соответствующими модулями макроматериалов хорошо известен, уже анализировался ранее и отмечался во многих работах [51, 73, 74].

Наконец, на рис. 54 показаны зависимости эффективного коэффициента Зенера, определенного по формуле (3.4.1). Обратим внимание на то, что относительный эффективный коэффициент Зенера равен обычному эффективному коэффициенту $r(A^{eff}) = A^{eff}$, поскольку для сплошного изотропного материала $A = 1$.

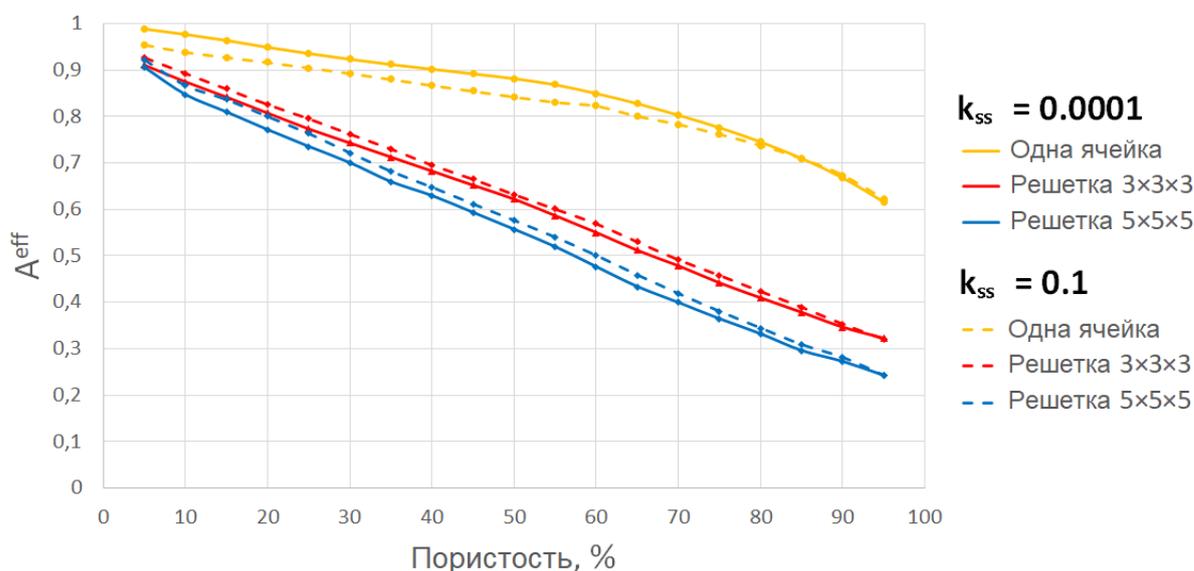


Рис. 54. Зависимости эффективного коэффициента Зенера A^{eff} от пористости для одной ячейки и для двух типов решеток при малых и больших величинах поверхностных модулей

Как видно из рисунка 54, с ростом пористости эффективная среда все больше отличается от изотропной, причем как в отсутствие поверхностных эффектов, так и при их наличии. Из этого можно сделать вывод, что геометрия ячейки и пористость сильнее влияют на ее анизотропные свойства, чем поверхностный эффект. Также можно заметить, что единичная ячейка дает сильно завышенные результаты.

В заключение отметим, что для ячеек и решеток при малой пористости ряд эффективных модулей отличается от соответствующих модулей сплошного материала. Особенно это заметно для модулей жесткости c_{11}^{eff} и c_{12}^{eff} , а также для эффективных

модулей Юнга решеток. Такое поведение можно объяснить тем, что ячейка Гибсона-Эшби при очень малой пористости имеет разрезы, похожие на трещины, но теория трещин в данном исследовании не учитывалась. Таким образом, ячейки и решетки Гибсона-Эшби логично использовать в качестве моделей пен только при значительной пористости.

3.6. Численные эксперименты для наноразмерных ячеек различной конфигурации

В разделе 3.4 было рассмотрено влияние геометрической структуры ячейки на эффективные свойства композита. В разделе 3.5 рассматривалась наноразмерная модель с возникающими поверхностными эффектами на границах двух фаз. В заключительном разделе данной работы будут приведены результаты исследования совместного влияния геометрической структуры и поверхностных эффектов на эффективные свойства композита, составленного из ячеек Гибсона-Эшби.

В вычислительных экспериментах, описанных в этом разделе, в качестве материала было выбрано золото, аналогично с вычислениями в разделе 3.5. Данный материал является изотропным и имеет для сплошного материала следующие механические характеристики: модуль Юнга $E_f = 70$ (ГПа), коэффициент Пуассона $\nu_f = 0,42$. Численные эксперименты проводились для регулярных решеток $3 \times 3 \times 3$ при пористости P , варьируемой от 65% до 95% с шагом 5%.

Для коэффициента пропорциональности k_{ss} , моделирующего поверхностный эффект, выбирались значения $k_{ss} = 0,0001$ и $k_{ss} = 0,1$. Данные значения по формуле (2.4.1) соответствуют ячейкам с реальной толщиной ребер $h_{real} \approx 10$ (нм) и $h_{real} \approx 0,1$ (нм), соответственно. В первом случае размерным эффектом можно пренебречь, но во втором случае поверхностные напряжения значительно влияют на эффективные модули композита. Геометрическая конфигурация ячейки зависит от толщины ребер, как описано в разделах 2.5 и 3.3. Данный численный эксперимент проводился на оригинальных ячейках, то есть $a = L/2$, и на ячейках с ребрами предельно большой и предельно малой толщины. Значения толщин для оригинальных ячеек выбирались из таблицы 1, а предельных значения – из таблицы 2.

На рисунках 55 – 59 показаны графики зависимостей относительных модулей от пористости для решеток $3 \times 3 \times 3$, составленных их ячеек Гибсона-Эшби с различной геометрической конфигурацией. Сплошные линии соответствуют вычислениям при коэффициенте пропорциональности $k_{ss} = 0,0001$, пунктирные – вычислениям при $k_{ss} =$

0,1. Синие линии соответствуют ячейкам с предельно тонкими ребрами, красные линии – оригинальным ячейкам, у которых внутренний каркас равен половине всей ячейки ($a = L/2$), а желтые линии – ячейкам с предельно толстыми ребрами.

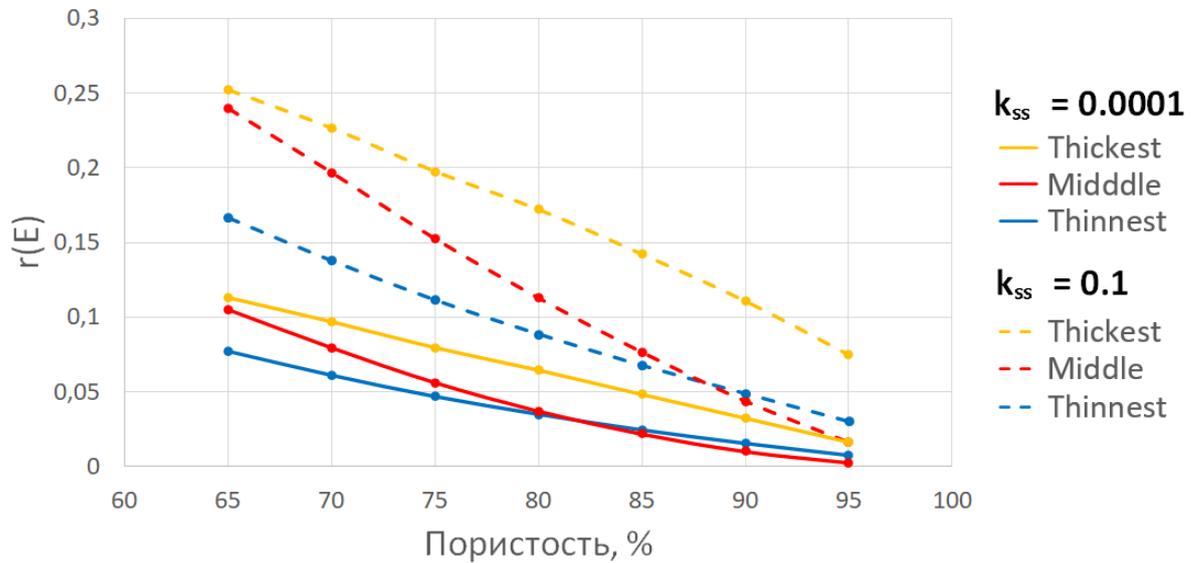


Рис. 55. Зависимости относительного эффективного модуля Юнга от пористости при различной конфигурации ячеек и значениях k_{ss}

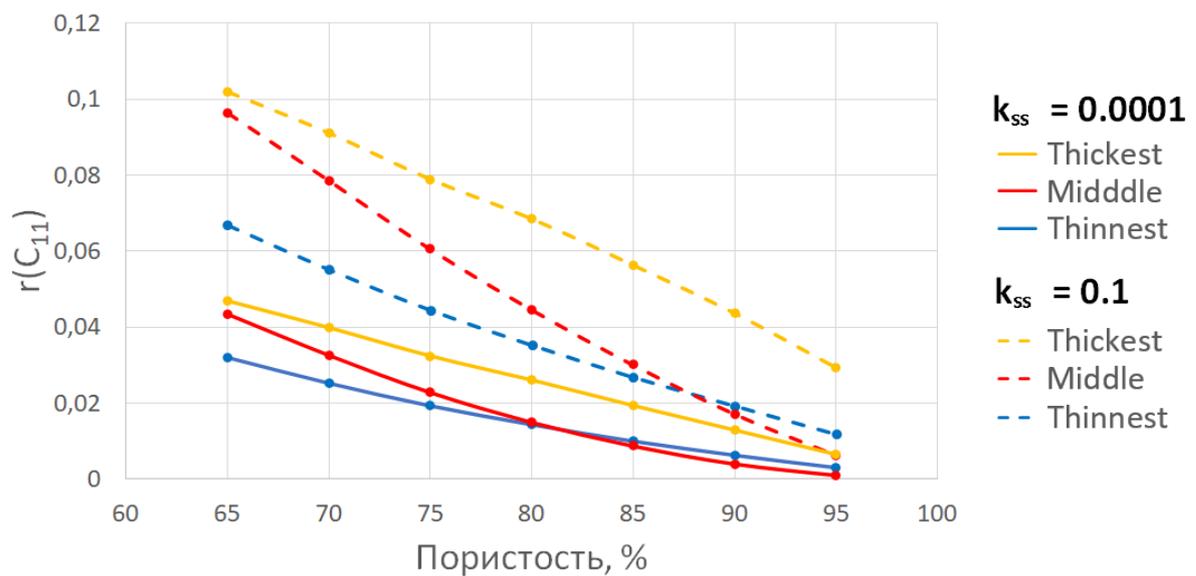


Рис. 56. Зависимости относительного эффективного модуля жесткости $r(C_{11})$ от пористости при различной конфигурации ячеек и значениях k_{ss}

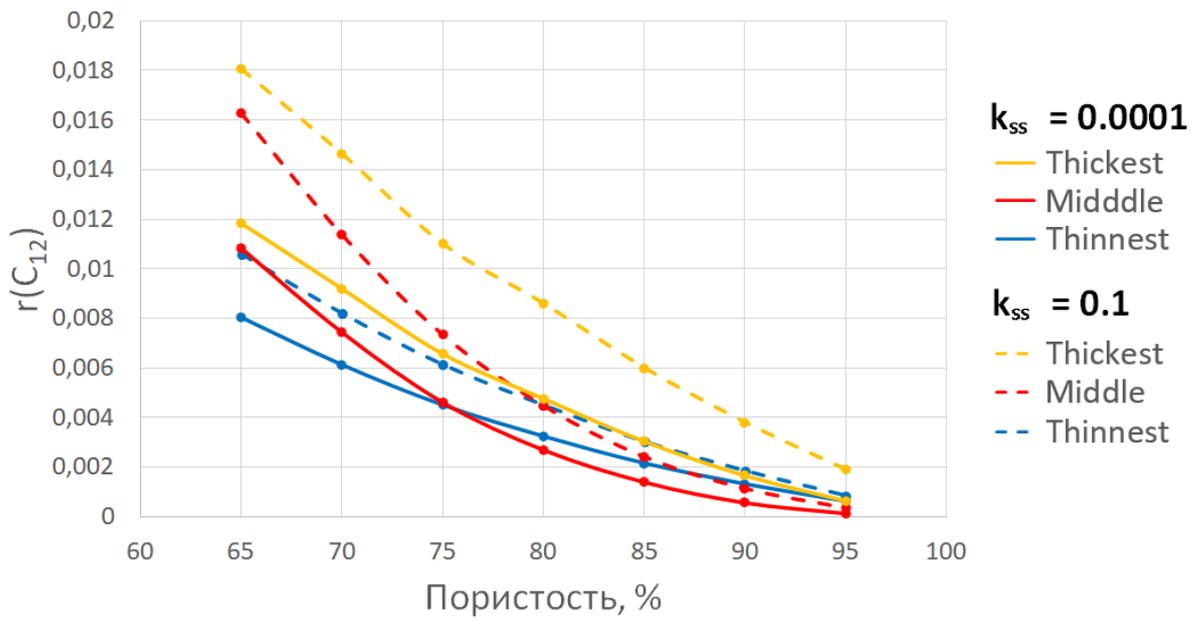


Рис. 57. Зависимости относительного эффективного модуля жесткости $r(c_{12})$ от пористости при различной конфигурации ячеек и значениях k_{ss}

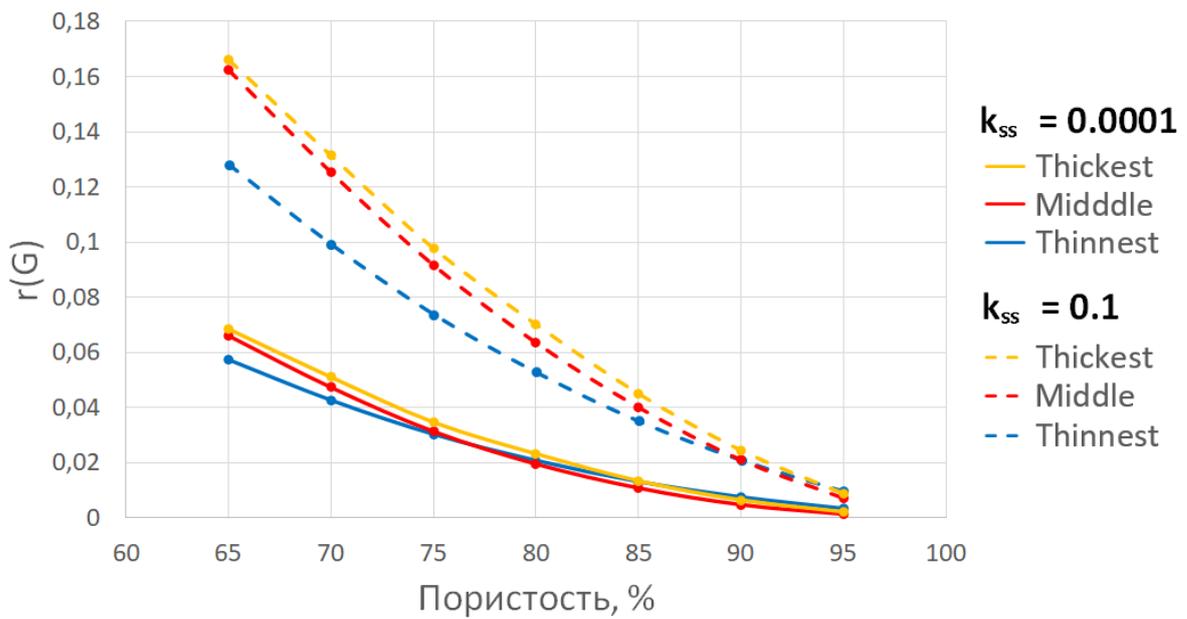


Рис. 58. Зависимости относительного эффективного модуля сдвига $r(G) = r(c_{44})$ от пористости при различной конфигурации ячеек и значениях k_{ss}

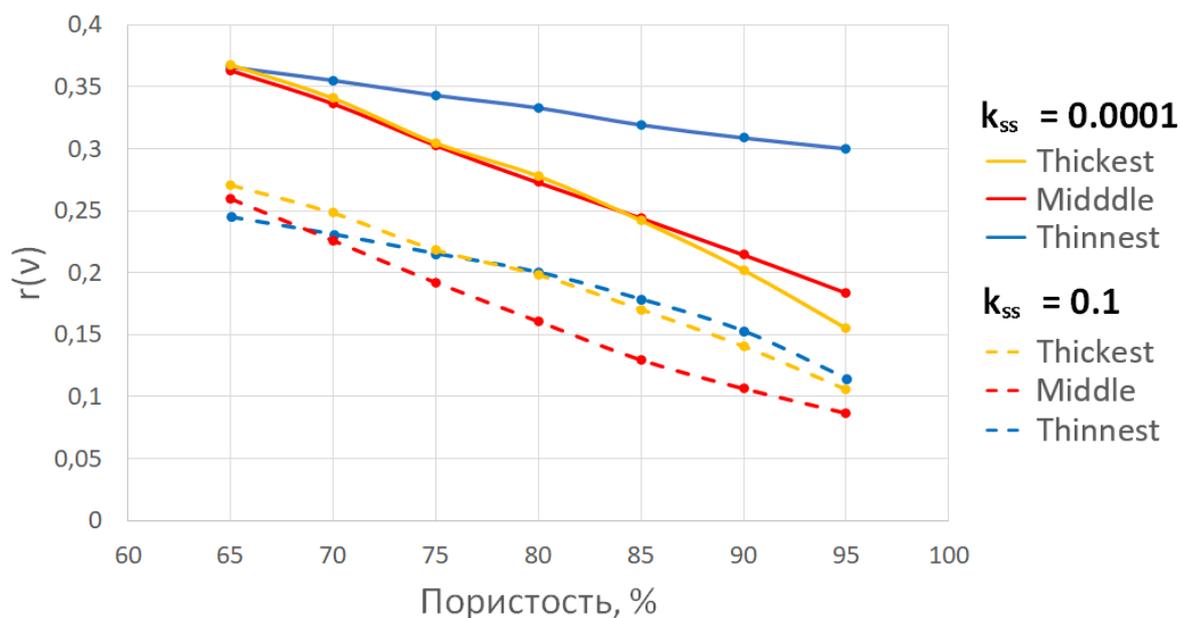


Рис. 59. Зависимости относительного эффективного коэффициента Пуассона $r(v)$ от пористости при различной конфигурации ячеек и значениях k_{ss}

На рисунках 55 – 58 наблюдаются такие же тенденции, как и в рассмотренных ранее разделах. Именно с ростом коэффициента пропорциональности или с увеличением толщины ребер растут и эффективные модули. В данном разделе определим, какие параметры более сильно влияют на эффективные модули композита.

На рисунке 55 рассмотрим линии, соответствующие решетке, составленной из оригинальных ячеек Гибсона-Эшби с пренебрежимо малым значением коэффициента пропорциональности. Если отдельно увеличить толщину ребер до предельно допустимого значения, то данный случай соответствует сплошной желтой линии. Если же отдельно увеличить коэффициент пропорциональности до $k_{ss} = 0,1$, что соответствует наноразмерной ячейке с реальной толщиной ребра $h_{real} \approx 0,1$ (нм), то данный случай будет соответствовать красной пунктирной линии. Так как красная пунктирная линия выше сплошной желтой для всех значений пористости P от 65% до 95%, то можно сделать вывод, что влияние размерного эффекта на упругие характеристики пористых композитов выше, чем влияние геометрической структуры данного композита.

Аналогичные тенденции наблюдаются для эффективных модулей жесткости $r(c_{11})$ и модулей сдвига $r(G)$. Эффективные значения коэффициента Пуассона также в большей степени зависят от поверхностных напряжений, чем от геометрической структуры композита, поскольку на рисунке 59 красная пунктирная линия находится значительно ниже сплошной желтой.

На рисунке 57 на графиках, описывающих поведение относительных эффективных модулей жесткости $r(c_{12})$, не наблюдается таких тенденций. Напротив, при пористости более 80% эффективные модули для ячеек с предельно толстыми ребрами могут превосходить эффективные значения для ячеек с поверхностными напряжениями. Однако данные результаты не очень существенны, поскольку значения относительных модулей жесткости $r(c_{12})$ при пористости более 80% крайне малые (порядка 10^{-3}).

Заключение

В представленных исследованиях пористых упругих материалов использовался комплексный подход, основанный на теории эффективных модулей, моделировании представительных объемов с пористой структурой и методе конечных элементов. Для композитов с наноразмерными порами была применена модель Гуртина-Мурдоха поверхностных напряжений на границах материала с порами. Были рассмотрены модели гомогенизации двухфазных упругих композитов с поверхностными напряжениями на границе двух фаз, которые отражают размерные эффекты в наноматериалах.

Для определения полного набора эффективных модулей упругих анизотропных наноразмерных композитов решался набор краевых задач в неоднородных представительных объемах с линейными по перемещениям граничными условиями. Сформулированные задачи для упругих сред решались численно с использованием специально разработанных программ в конечно-элементном пакете ANSYS. Численные расчеты эффективных модулей были выполнены для нанопористого изотропного материала, силикона кубической сингонии и бериллия гексагональной сингонии.

Для композитов со случайной и с частично случайной структурами пористости [49, 50, 108] представительные объемы состояли из кубической конечно-элементной решетки, в которых элементам по специальным алгоритмам присваивались свойства различных фаз. Были рассмотрены три типа генерации представительных объемов: один – со случайной структурой пористости, и два алгоритма из пакета ACELAN-COMPOS, поддерживающие связность обеих фаз (тип связности 3-3).

Для учета поверхностных напряжений рассматривались оболочные (мембранные) упругие элементы, которыми покрывались границы контакта материала и пор. Для автоматизированного покрытия внутренних границ пор мембранами применялся следующий алгоритм. Построенный массив объемных элементов с материальными свойствами пор по внешним границам покрывался ответными контактными элементами. Далее, контактные элементы, которые были на внешней границе, удалялись. Оставшиеся контактные элементы заменились на оболочные элементы с опцией только мембранных напряжений. Таким образом, все грани соприкосновения объемных упругих элементов с порами покрылись мембранными упругими конечными элементами. Данный подход был разработан для поверхностных конечных элементов с гранями, параллельными осям декартовой системы координат. Это позволило исследовать пористые композиты с

каркасами, выполненными из изотропного материала, из материала кубической сингонии и из материала гексагональной сингонии [49, 50, 51, 108].

Далее в блоке постпроцессора ANSYS вычислялись усредненные напряжения, причем как по объемным элементам, так и по поверхностным. Наконец, по соответствующим формулам метода эффективных модулей через найденные средние напряжения вычислялись эффективные модули пористого композита с поверхностными эффектами.

В результате проведенных вычислительных экспериментов обнаружены тенденции, аналогичные отмеченным в работах других авторов. Например, при небольшой пористости наноразмерное тело может обладать большей жесткостью, чем тело обычных размеров. Кроме того, эффективные упругие жесткости для тел обычных размеров убывают с ростом пористости, но для наноразмерного композита данные характеристики могут как уменьшаться, так и увеличиваться. Также были сравнены результаты аналогичных вычислений для композитов с различной генерацией сеток. Было отмечено, что из-за поверхностных эффектов геометрические особенности наноразмерных тел могут оказывать гораздо большее влияние, чем для тел обычных размеров. Также был подтвержден вывод, что чем меньше размер отдельных пор, тем выше жесткость композита.

Значительная часть диссертационной работе была посвящена исследованию эффективных упругих свойств пористого пенного материала, моделируемого массивами ячеек Гибсона–Эшби с регулярной и нерегулярной структурой [45, 70, 109, 110]. Здесь также исследования проводились как на макро-, так и на наноуровне. Разработан программный инструментарий на языке APDL ANSYS, позволяющий строить массивы ячеек Гибсона–Эшби, получать из них конечно-элементные модели с управляемыми характеристиками, решать численно задачи гомогенизации и определять полный набор эффективных модулей жесткости.

Вычислительные эксперименты показали, что для нерегулярных решеток может наблюдаться достаточно существенный разброс значений упругих модулей, особенно для эффективных коэффициентов Пуассона. Отмечено, что для нерегулярных решеток характерно появление геометрической анизотропии эффективных свойств композита, которая может достаточно сильно проявляться для высокопористых пен.

Эксперименты, проводимые на решетках, составленных из ячеек с различной геометрической конфигурацией, показали, что при одинаковой пористости значения эффективных модулей могут значительно отличаться. Причем, при одинаковой пористости

ячейка с более толстыми ребрами обладает большей жесткостью, чем ячейка с тонкими ребрами.

Здесь также было показано, что поверхностные напряжения, проявляющиеся при наноразмерных ячейках и решетках, приводят к возрастанию эффективных модулей по сравнению с соответствующими модулями ячеек и решеток обычных размеров. Более того, было получено, что при некоторых значениях пористости и размерах ячеек относительный модуль Юнга наноразмерного материала превышал соответствующий относительный модуль Юнга макроразмерного материала более, чем на 50 %.

Численные эксперименты для комбинированных моделей показали, что поверхностные напряжения имеют большее влияние на эффективные свойства пористого композита, чем геометрическая конфигурация ячеек.

Список литературы

1. Cellular Ceramics: Structure, Manufacturing, Properties and Applications. Scheffler M., Colombo P. (eds.). – John Wiley & Sons, 2005.
2. Gibson L.J., Ashby M.F. Cellular solids: structure and properties. – Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1997. – 510 p.
3. Alabort E., Barba D., Reed R.C. Design of metallic bone by additive manufacturing // *Scr. Mater.* – 2019. – Vol. 164. – P. 110-114.
4. Alsalla H., Hao L., Smith C. Fracture toughness and tensile strength of 316L stainless steel cellular lattice structures manufactured using the selective laser melting technique // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2016. – Vol. 669. – P. 1-6.
5. Benedetti M., Klarin J., Johansson F., Fontanari V., Luchin V., Zappini G., Molinari A. Study of the compression behaviour of Ti6Al4V trabecular structures produced by additive laser manufacturing // *Materials.* – 2019. – Vol. 12, iss. 9. – Article 1471.
6. Bianchi G., Gianella S., Ortona A. Design and additive manufacturing of periodic ceramic architectures // *J. Ceram. Sci. Tech.* – 2017. Vol. 08, iss. 01. P. 59-66.
7. Blennow P., Hjelm J., Klemensø T., Ramousse S., Kromp A., Leonide A., Weber A. Manufacturing and characterization of metal-supported solid oxide fuel cells // *J. Power Sources.* – 2011. – Vol. 196, iss. 17. – P. 7117-7125.
8. Fleck N.A., Deshpande V.S., Ashby M.F. Micro-architected materials: past, present and future // *Proc. Royal Soc. Lond. A.* – 2010. – Vol. 466, iss. 2121. – P. 2495-2516.
9. Maheo L., Viot P., Bernard D., Chirazi A., Ceglia G., Schmitt V., Mondain-Monval O. Elastic behavior of multi-scale, open-cell foams // *Compos. Part B – Eng.* – 2013. – Vol. 44, iss. 1. – P. 172-183.
10. Ramirez D.A., Murr L.E., Li S.J., Tian Y.X., Martinez E., Martinez J.L., Machado B.I., Gaytan S.M., Medina F., Wicker R.B. Open-cellular copper structures fabricated by additive manufacturing using electron beam melting // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2011. – Vol. 528, iss. 16-17. – P. 5379-5386.
11. Wang G., Shen L., Zhao J., Liang H., Xie D., Tian Z., Wang C. Design and compressive behavior of controllable irregular porous scaffolds: based on Voronoi-tessellation and for additive manufacturing // *ACS Biomater. Sci. Eng.* – 2018. – Vol. 4, iss. 2. – P. 719-727.
12. Xiao Z., Yang Y., Xiao R., Bai Y., Song C., Wang D. Evaluation of topology-optimized lattice structures manufactured via selective laser melting // *Mater. Des.* – 2018. – Vol. 143. – P. 27-37.

13. Yan C., Hao L., Hussein A., Young P., Huang J., Zhu W. Microstructure and mechanical properties of aluminium alloy cellular lattice structures manufactured by direct metal laser sintering // *Mater. Sci. Eng. A.* – 2015. – Vol. 628. – P. 238-246.
14. Zhu F., Lu G., Ruan D., Wang Z. Plastic deformation, failure and energy absorption of sandwich structures with metallic cellular cores // *Int. J. Prot. Struct.* – 2010. – Vol. 1, iss. 4. – P. 507-541.
15. Hössinger-Kalteis A., Reiter M., Jerabek M., Major Z. Overview and comparison of modelling methods for foams // *J. Cell. Plast.* – First Published December 15, 2020. – P. 1–51.
16. Pan C., Han V. , Lu J. Design and optimization of lattice structures: A review // *Appl. Sci.* – 2020. – Vol. 10. –Article 6374.
17. Srivastava V., Srivastava R. On the polymeric foams: modeling and properties // *J. Mater. Sci.* – 2014. – Vol. 49. – P. 2681–2692.
18. Gibson LJ, Ashby M.F. The mechanics of three-dimensional cellular materials // *Proc. Royal Soc. Lond. A* 1982. – Vol. 382, iss. 1782. – P. 43-59.
19. Ashby M.F. The mechanical properties of cellular solids // *Metall. Mater. Trans. A.* – 1983. – Vol. 14, iss. 9. – P. 1755-1769.
20. Ashby M.F. The properties of foams and lattices // *Phil. Trans. R. Soc. A.* – 2006. – Vol. 364, iss. 1838. – P. 15-30.
21. Gibson L.J. Biomechanics of cellular solids // *J. Biomech.* – 2005. – Vol. 38. – P. 377–399.
22. Avalle M., Scattina A. Mechanical properties and impact behavior of a microcellular structural foam // *Lat. Am. J. Solids Struct.* – 2014. – Vol. 11, iss. 2. – P. 200-222.
23. Uhlířová T., Pabst W. Conductivity and Young's modulus of porous metamaterials based on Gibson-Ashby cells // *Scr. Mater.* – 2019. – Vol. 159. P. 1–4.
24. Zhou J., Gao Z., Allameh S., Akpan E., Cuitino A.M., Soboyejo W.O. Multiscale deformation of open cell aluminum foams // *Mech. Adv. Mater. Struct.* – 2005. – Vol. 12, iss. 3. – P. 201-216.
25. Andresen S., Bäger A., Hamm C. Eigenfrequency maximisation by using irregular lattice structures // *J. Sound Vib.* – 2020. – Vol. 465. – Article 115027.
26. Marvi-Mashhadi M., Lopes C.S., LLorca J. Modelling of the mechanical behavior of polyurethane foams by means of micromechanical characterization and computational homogenization // *Int. J. Solids Struct.* – 2018. – Vol. 146. – P. 154–166.

27. Marvi-Mashhadi M., Lopes C.S., LLorca J. Effect of anisotropy on the mechanical properties of polyurethane foams: An experimental and numerical study // *Mech. Mater.* – 2018. – Vol. 124. – P. 143–154.
28. Mukhopadhyay T., Adhikari S. Equivalent in-plane elastic properties of irregular honeycombs: An analytical approach // *Int. J. Solids Struct.* – 2016. – Vol. 91. – P. 169-184.
29. Mukhopadhyay T., Adhikari S. Effective in-plane elastic moduli of quasi-random spatially irregular hexagonal lattices // *Int. J. Eng. Sci.* – 2017. – Vol. 119. – P. 142-179.
30. Pabst W., Uhlířová T., Gregorová E., Wiegmann A. Young's modulus and thermal conductivity of closed-cell, open-cell and inverse ceramic foams – model-based predictions, cross-property predictions and numerical calculations // *J. Eur. Ceram. Soc.* – 2018. – Vol. 38. – P. 2570–2578.
31. Roberts A.P., Garboczi E.J. Elastic moduli of model random three-dimensional closed-cell cellular solids // *Acta Mater.* – 2001. – Vol. 49, iss. 2. – P. 189-197.
32. Kaoua S.A., Dahmoun D., Belhadj A.E., Azzaz M. Finite element simulation of mechanical behaviour of nickel-based metallic foam structures // *J. Alloys Compd.* – 2009. – Vol. 471, iss. 1-2. – P. 147-152.
33. Koudelka P., Jiroušek O., Valach J. Determination of mechanical properties of materials with complex inner structure using microstructural models // *Mach Technol Mater.* – 2011. – Vol. 1, iss. 3. – P. 39-42.
34. Dillard T, N'guyen F, Maire E, Salvo L, Forest S, Bienvenu Y, et al. 3-D quantitative image analysis of open-cell nickel foams under tension and compression loading using X-ray microtomography // *Philos. Mag.* – 2005. – Vol. 85, iss. 19. – P. 2147–2175.
35. Singh R., Lee P.D., Lindley T.C., Kohlhauser C., Hellmich C., Bram M., Imwinkelried T., Dashwood R.J. Characterization of the deformation behavior of intermediate porosity interconnected Ti foams using micro-computed tomography and direct finite element modeling // *Acta Biomater.* – 2010. – Vol. 6, iss. 6. – P. 2342-2351.
36. Cristescu N.D., Craciun E.-M., Soós E. *Mechanics of Elastic Composites.* – CRC Press, 2003.
37. Kachanov M., Sevostianov I. *Micromechanics of materials, with applications / Serie: Solid mechanics and its applications.* – Vol. 249. – Springer Int. Publ. AG, 2018.
38. Mills N.J. Finite element models for the viscoelasticity of open-cell polyurethane foam // *Cell. Polym.* – 2006. – Vol. 25, iss. 5. – P. 293-316.
39. Ortona A., Rezaei E. Modeling the properties of cellular ceramics: From foams to lattices and back to foams // *Adv. Sci. Tech.* – 2014. – Vol. 91. –P. 70–78.

40. Zhu H.X., Hobdell J.R., Windle A.H. Effects of cell irregularity on the elastic properties of open-cell foams // *Acta Mater.* – 2000. – Vol. 48, iss. 20. – P. 4893–4900.
41. Düster A., Sehlhorst H.G., Rank E. Numerical homogenization of heterogeneous and cellular materials utilizing the finite cell method // *Comput. Mech.* – 2012. – Vol. 50. – P. 413–431.
42. Parvizian J., Düster A., Rank E. Finite cell method – h- and p-extension for embedded domain problems in solid mechanics // *Comput. Mech.* – 2007. – Vol. 41. – P. 121–133.
43. Krishnan A. The interfacial failure of bonded materials and composites: Dissertation. – Nashville, Tennessee: Vanderbilt University, 2010.
44. Наседкин А.В., Наседкина А.А., Нассар М.Э. Гомогенизация пористых пьезокомполитов с экстремальными свойствами на границах пор методом эффективных модулей // *Изв. РАН. МТТ.* – 2020. – № 6. – С. 82–92.
45. Корниевский А.С., Наседкин А.В. Сравнение моделей пен, составленных из регулярных и нерегулярных массивов открытых ячеек Гибсона-Эшби // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика.* – 2021. – №3. – С. 70-83.
46. Roberts A.P., Garboczi, E.J. Elastic properties of model porous ceramics // *J. Amer. Ceram. Soc.* – 2000. – Vol. 83, iss. 12. – P. 3044-3048.
47. Авдеенко А.М., Крупин Ю.А., Пименова Н.А. Ротационные моды деформации пористых структур // *Вестник ПНИПУ. Механика.* – 2014. – № 3. – С. 5–16.
48. Pia G., Delogu F. Mechanical properties of nanoporous Au: From empirical evidence to phenomenological modeling // *Metals.* – 2015. – Vol. 5, iss. 3. – P. 1665-1694.
49. Наседкин А.В., Корниевский А.С. Конечно-элементное моделирование эффективных свойств анизотропных упругих материалов со случайной наноразмерной пористостью // *Вычислительная механика сплошных сред.* – 2017. – Т. 10. – №. 4. – С. 375-387.
50. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Finite element homogenization of elastic materials with open porosity at different scale levels // *AIP Conf. Proc.* –2018. – Vol. 2046, iss. 1. – Article 020064.
51. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Numerical investigation of effective moduli of porous elastic material with surface stresses for various structures of porous cells / *Wave Dynamics, Mechanics and Physics of Microstructured Metamaterials. Advanced Structured Materials.* – Vol. 109. – M.A. Sumbatyan (Ed.) – Springer, Singapore, 2019. – Ch. 15. – P. 217-228.

52. Lu G. et al. Mechanical properties of porous materials // *Journal of Porous Materials*. – 1999. – Vol. 6. – No. 4. – P. 359-368.
53. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. – М.: Изд-во МГУ, 1984. – 336 с.
54. Елисеев В. В. Механика упругих тел. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999. – 341 с.
55. Lv Y. et al. Metal material, properties and design methods of porous biomedical scaffolds for additive manufacturing: A review // *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*. – 2021. – Vol. 9. – P. 641130.
56. Maconachie T. et al. SLM lattice structures: Properties, performance, applications and challenges // *Materials & Design*. – 2019. – Vol. 183. – P. 108137.
57. Berger J. B., Wadley H. N. G., McMeeking R. M. Mechanical metamaterials at the theoretical limit of isotropic elastic stiffness // *Nature*. – 2017. – Vol. 543. – No. 7646. – P. 533-537.
58. Yang C. et al. Mechanical performances of four lattice materials guided by topology optimisation // *Scripta Materialia*. – 2020. – Vol. 178. – P. 339-345.
59. Alaña M. et al. Understanding elastic anisotropy in diamond based lattice structures produced by laser powder bed fusion: Effect of manufacturing deviations // *Materials & Design*. – 2020. – Vol. 195. – P. 108971.
60. Li D. et al. Comparison of mechanical properties and energy absorption of sheet-based and strut-based gyroid cellular structures with graded densities // *Materials*. – 2019. – Vol. 12. – No. 13. – P. 2183.
61. Dai R. et al. Understanding mechanical behavior of metallic foam with hollow struts using the hollow pentagonal dodecahedron model // *Scripta Materialia*. – 2020. – Vol. 182. – P. 114-119.
62. Ma Q. et al. Elastically-isotropic open-cell minimal surface shell lattices with superior stiffness via variable thickness design // *Additive Manufacturing*. – 2021. – Vol. 47. – P. 102293.
63. Feng J. et al. Isotropic porous structure design methods based on triply periodic minimal surfaces // *Materials & Design*. – 2021. – Vol. 210. – P. 110050.
64. Lohmuller P. et al. Architectural effect on 3D elastic properties and anisotropy of cubic lattice structures // *Materials & Design*. – 2019. – Vol. 182. – P. 108059.
65. Lumpe T. S., Stankovic T. Exploring the property space of periodic cellular structures based on crystal networks // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2021. – Vol. 118. – №. 7. – P. e2003504118.

66. Ranganathan S. I., Ostoja-Starzewski M. Universal elastic anisotropy index // *Physical review letters*. – 2008. – Vol. 101. – No. 5. – P. 055504.
67. Soyarslan C. et al. 3D stochastic bicontinuous microstructures: Generation, topology and elasticity // *Acta materialia*. – 2018. – Vol. 149. – P. 326-340.
68. Hayes M., Shuvalov A. On the extreme values of Young's modulus, the shear modulus, and Poisson's ratio for cubic materials. – 1998.
69. Ting T. C. T., Chen T. Poisson's ratio for anisotropic elastic materials can have no bounds // *The quarterly journal of mechanics and applied mathematics*. – 2005. – Vol. 58. – No. 1. – P. 73-82.
70. Kornievsky A. S., Nasedkin A. V. Finite element analysis of foam models based on regular and irregular arrays of cubic open cells having uniform or normal distributions // *Advanced Materials Modelling for Mechanical, Medical and Biological Applications*. – Springer, Cham, 2022. – P. 251-269.
71. Meyers M. A., Chawla K. K. *Mechanical behavior of materials*, second ed. – Cambridge university press, 2008.
72. Dillard T. et al. 3D quantitative image analysis of open-cell nickel foams under tension and compression loading using X-ray microtomography // *Philosophical Magazine*. – 2005. – Vol. 85. – No. 19. – P. 2147-2175.
73. Duan H. L. et al. Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification // *Acta Materialia*. – 2006. – Vol. 54. – No. 11. – P. 2983-2990.
74. Eremeyev V. A. On effective properties of materials at the nano-and microscales considering surface effects // *Acta Mechanica*. – 2016. – Vol. 227. – No. 1. – P. 29-42.
75. Longley W. R., Name R. G. V. *The Collected Works of J. Willard Gibbs, PHD., LL. D. I Thermodynamics*. – 1928.
76. Gurtin M. E., Ian Murdoch A. A continuum theory of elastic material surfaces // *Archive for rational mechanics and analysis*. – 1975. – Vol. 57. – No. 4. – P. 291-323.
77. Chatzigeorgiou G., Javili A., Steinmann P. Multiscale modelling for composites with energetic interfaces at the micro-or nanoscale // *Mathematics and Mechanics of Solids*. – 2015. – Vol. 20. – No. 9. – P. 1130-1145.
78. Chatzigeorgiou G., Meraghni F., Javili A. Generalized interfacial energy and size effects in composites // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2017. – Vol. 106. – P. 257-282.
79. Duan H. L. et al. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2005. – Vol. 53. – No. 7. – P. 1574-1596.

80. Firooz S. et al. Bounds on size effects in composites via homogenization accounting for general interfaces // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. – 2020. – Vol. 32. – No. 1. – P. 173-206.
81. Firooz S., Javili A. Understanding the role of general interfaces in the overall behavior of composites and size effects // *Computational Materials Science*. – 2019. – Vol. 162. – P. 245-254.
82. Gu S. T., He Q. C. Interfacial discontinuity relations for coupled multifield phenomena and their application to the modeling of thin interphases as imperfect interfaces // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2011. – Vol. 59. – No. 7. – P. 1413-1426.
83. Gu S. T., Liu J. T., He Q. C. Size-dependent effective elastic moduli of particulate composites with interfacial displacement and traction discontinuities // *International Journal of Solids and Structures*. – 2014. – Vol. 51. – No. 13. – P. 2283-2296.
84. Javili A., Steinmann P., Mosler J. Micro-to-macro transition accounting for general imperfect interfaces // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2017. – Vol. 317. – P. 274-317.
85. Le Quang H., He Q. C. Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces // *Mechanics of materials*. – 2008. – Vol. 40. – No. 10. – P. 865-884.
86. Shi P. Imperfect interface effect for nano-composites accounting for fiber section shape under antiplane shear // *Applied Mathematical Modelling*. – 2017. – Vol. 43. – P. 393-408.
87. Gad A. I. et al. Finite element modeling for elastic nano-indentation problems incorporating surface energy effect // *International Journal of Mechanical Sciences*. – 2014. – Vol. 84. – P. 158-170.
88. Wei G., Shouwen Y. U., Ganyun H. Finite element characterization of the size-dependent mechanical behaviour in nanosystems // *Nanotechnology*. – 2006. – Vol. 17. – No. 4. – P. 1118.
89. Tian L., Rajapakse R. Finite element modelling of nanoscale inhomogeneities in an elastic matrix // *Computational Materials Science*. – 2007. – Vol. 41. – No. 1. – P. 44-53.
90. Riaz U., Ashraf S. M. Application of finite element method for the design of nanocomposites // *Computational finite element methods in nanotechnology*. – 2012. – P. 241-290.
91. Brisard S., Dormieux L., Kondo D. Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects // *Computational Materials Science*. – 2010. – Vol. 48. – No. 3. – P. 589-596.

92. Chen T., Dvorak G. J., Yu C. C. Solids containing spherical nano-inclusions with interface stresses: effective properties and thermal–mechanical connections // *International Journal of Solids and Structures*. – 2007. – Vol. 44. – No. 3-4. – P. 941-955.
93. Chen Q., Pugno N., Li Z. Influence of surface stress on elastic constants of nanohoneycombs // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. – 2013. – Vol. 53. – P. 217-222.
94. Еремеев В. А., Морозов Н. Ф. Об эффективной жесткости нанопористого стержня // *Доклады академии наук. – Федеральное государственное бюджетное учреждение "Российская академия наук"*, 2010. – Т. 432. – №. 4. – С. 473-476.
95. Fan T., Yang L. Effective Young's modulus of nanoporous materials with cuboid unit cells // *Acta Mechanica*. – 2017. – Vol. 228. – No. 1. – P. 21-29.
96. Fan T. Surface Effects on Effective Young's Modulus of Nanoporous Structures // *International Journal of Structural Stability and Dynamics*. – 2020. – Vol. 20. – No. 07. – P. 2050073.
97. Feng X. Q. et al. Surface effects on the elastic modulus of nanoporous materials // *Applied Physics Letters*. – 2009. – Vol. 94. – No. 1. – P. 011916.
98. Xia R. et al. Surface effects on the mechanical properties of nanoporous materials // *Nanotechnology*. – 2011. – Vol. 22. – No. 26. – P. 265714.
99. Javili A., Steinmann P. On thermomechanical solids with boundary structures // *International Journal of Solids and Structures*. – 2010. – Vol. 47. – No. 24. – P. 3245-3253.
100. Kaessmair S., Javili A., Steinmann P. Thermomechanics of solids with general imperfect coherent interfaces // *Archive of Applied Mechanics*. – 2014. – Vol. 84. – No. 9. – P. 1409-1426.
101. Quang H. L., He Q. C. Estimation of the effective thermoelastic moduli of fibrous nanocomposites with cylindrically anisotropic phases // *Archive of Applied Mechanics*. – 2009. – Vol. 79. – No. 3. – P. 225-248.
102. Kushch V. I., Sevostianov I., Chernobai V. S. Effective conductivity of composite with imperfect contact between elliptic fibers and matrix: Maxwell's homogenization scheme // *International Journal of Engineering Science*. – 2014. – Vol. 83. – P. 146-161.
103. Wu L. Bounds on the effective thermal conductivity of composites with imperfect interface // *International Journal of Engineering Science*. – 2010. – Vol. 48. – No. 9. – P. 783-794.
104. Дерффель К. Статистика в аналитической химии. – М.: Мир, 1994. – 268 с.

105. Needs R. J., Godfrey M. J., Mansfield M. Theory of surface stress and surface reconstruction // *Surface Science*. – 1991. – Vol. 242. – No. 1-3. – P. 215-221.
106. Kudimova A.B., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganessian P.A., Soloviev A.N. Models of porous piezocomposites with 3-3 connectivity type in ACELAN finite element package // *Materials physics and mechanics*. – 2018. P. 16- 24.
107. Корниевский А.С., Наседкин А.В. Моделирование в ANSYS пористых композитов с учетом поверхностных напряжений // *Мехмат: студенческая наука* – 2015. Ч.2. Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета, 2015. С. 51-53.
108. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Finite element modeling and computer design of anisotropic elastic porous composites with surface stresses / *Wave Dynamics and Composite Mechanics for Microstructured Materials and Metamaterials. Advanced Structured Materials*. – Vol. 59. – M.A. Sumbatyan (Ed.). – Springer, Singapore, 2017. – Ch.6. – P. 107-122.
109. Kornievsky A., Nasedkin A. Numerical Investigation of Mechanical Properties of Foams Modeled by Regular Gibson–Ashby Lattices with Different Internal Structures // *Materialia*. – 2022. – Vol. 26. – P. 101563.
110. Kornievsky A., Nasedkin A. Finite element study of effective moduli of nanoporous materials composed of regular Gibson-Ashby cells with surface stresses / *Physics and Mechanics of New Materials and Their Applications. Springer Proceedings in Materials*. – Vol. 20. – Eds: I.A. Parinov, S.-H. Chang, A.N. Soloviev. – Springer Cham, 2023. – Ch. 22. – P. 276-289.

Приложение

Разработанный комплекс программ для APDL ANSYS включал в себя набор следующих программ:

- 1) программы расчета полного набора эффективных модулей пористого композита в кубическом представительном объеме со случайной структурой пористости (для композита без учета поверхностных напряжений и для композита с матрицей материала гексагонального класса анизотропии при учете поверхностных напряжений);
- 2) программы расчета полного набора эффективных модулей пористого композита в кубическом представительном объеме со структурой пористости, считываемой из файлов, созданных в пакете ACELAN-COMPOS (для композита без учета поверхностных напряжений и для композита с матрицей материала гексагонального класса анизотропии при учете поверхностных напряжений);
- 3) программы расчета полного набора эффективных модулей пористого композита в представительном объеме, основанном на ячейке Гибсона-Эшби как без учета, так и с учетом поверхностных напряжений (для одной ячейки с тонкими и толстыми ребрами; для регулярных решеток с тонкими и толстыми ребрами; для нерегулярных решеток; для ячеек и решеток с различной внутренней конфигурацией).

Ниже приведена одна программа, которая использовалась для решения задач гомогенизации (1.4.1) – (1.4.10) для ячейки Гибсона-Эшби при учете поверхностных напряжений.

```
! Инвертирование фона с черного на белый
/RGB,INDEX,100,100,100,0
/RGB,INDEX,0,0,0,15
/PLOPTS,INFO,2 ! Использовать формат вывода Auto-legend для подписей
/PLOPTS,LEG2,OFF
/PLOPTS,LOGO,OFF ! Логотип ANSYS не показывать в графическом виде
/PLOPTS,FRAME,OFF ! Не показывать рамку
/PLOPTS,DATE,OFF ! Не показывать дату
/PLOPTS,TITLE,OFF
/TRIAD,OFF
```

```
!----- Инициализация цикла -----
*DO,GLOBAL_INDEX,1,152
```

```
N_I = 19 ! Количество вариантов толщины балок
N_J = 8 ! Количество вариантов k_ss
```

```

GLOBAL_J = MOD((GLOBAL_INDEX - 1),N_J) + 1
GLOBAL_I = (GLOBAL_INDEX - 1)/N_J + 1
*IF,GLOBAL_I,LT,NINT(GLOBAL_I),THEN
    GLOBAL_I = NINT(GLOBAL_I) - 1
*ELSE
    GLOBAL_I = NINT(GLOBAL_I)
*ENDIF

! Массив значений толщины балок
*DIM,LH_LIST,ARRAY,19
LH_LIST(1) = 0.95 $ LH_LIST(2) = 0.9 $ LH_LIST(3) = 0.85
LH_LIST(4) = 0.8 $ LH_LIST(5) = 0.75 $ LH_LIST(6) = 0.7
LH_LIST(7) = 0.65 $ LH_LIST(8) = 0.6 $ LH_LIST(9) = 0.55
LH_LIST(10) = 0.5 $ LH_LIST(11) = 0.45 $ LH_LIST(12) = 0.4
LH_LIST(13) = 0.35 $ LH_LIST(14) = 0.3 $ LH_LIST(15) = 0.25
LH_LIST(16) = 0.2 $ LH_LIST(17) = 0.15 $ LH_LIST(18) = 0.1
LH_LIST(19) = 0.05

! Массив значений коэффициента пропорциональности
*DIM,K_SS_LIST,ARRAY,8
K_SS_LIST(1) = 0.0001 $ K_SS_LIST(2) = 0.001 $ K_SS_LIST(3) = 0.01
K_SS_LIST(4) = 0.05 $ K_SS_LIST(5) = 0.1 $ K_SS_LIST(6) = 0.5
K_SS_LIST(7) = 1.000001 $ K_SS_LIST(8) = 1.5

!----- Материальные свойства -----
/PREP7
f_r = 'GA_results_nano_thin' ! Название файла для сохранения результатов

! Геометрия
LF = 1 ! Размере ячейки
LC = LF/2 ! Половинка ячейки
LA = LC/2 ! Размер половинки ребра
LE = LF/20 ! Примерный размер элемента

K_SS = K_SS_LIST(GLOBAL_J)
LH = LH_LIST(GLOBAL_I)*LA ! Толщина ребер
LHH = LH/2
EPS_0 = 1
VOL_G1 = 1

! Материальные константы (все данные - в системе СИ)
ES = 70e9 ! Модуль Юнга золота
NUS = 0.42 ! Коэффициент Пуассона золота

! Вычисление компонент матрицы жесткостей
TEMP_PAR = ES/(1+NUS)/(1-2*NUS)
C11S = TEMP_PAR*(1-NUS)
C12S = TEMP_PAR*NUS
C44S = (C11S - C12S)/2

! MAT=1 (Золото)
TB,ANEL,1

```

TBDATA,1,C11S,C12S,C12S
TBDATA,7,C11S,C12S
TBDATA,12,C11S
TBDATA,16,C44S
TBDATA,19,C44S
TBDATA,21,C44S

! MAT=2 (Поверхностные мембраны)

R,2,1
TB,ANEL,2
TBDATA,1,C11S*K_SS,C12S*K_SS,C12S*K_SS
TBDATA,7,C11S*K_SS,C12S*K_SS
TBDATA,12,C11S*K_SS
TBDATA,16,C44S*K_SS
TBDATA,19,C44S*K_SS
TBDATA,21,C44S*K_SS

! TYPE=1 - упругий КЭ

ET,1,SOLID185

! TYPE=2 - Мембранный КЭ

ET,2,SHELL181,1

! TYPE=3 - Ответный КЭ для контактных задач

! (нужен для выделения границ ансамбля пор)

ET,3,TARGE170

MAT,1

TYPE,1

!----- Построение представительного объема -----

! Нижние ребра

BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LHH,LA-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA+LHH,-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH

BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LHH,LA-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA+LHH,-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH

BLOCK,-LA+LHH,-LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LHH,LA-LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LA+LHH,-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LHH,LA-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH

! Верхние ребра

BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LHH,LA-LHH,LA-LHH,LA+LHH

BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA+LHH,-LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH

BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LHH,LA-LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA+LHH,-LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH

BLOCK,-LA+LHH,-LHH,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,LHH,LA-LHH,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LA+LHH,-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,LHH,LA-LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH

! Боковые ребра

BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA+LHH,-LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LHH,LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,LHH,LA-LHH

BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA+LHH,-LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LHH,LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LHH,LA-LHH

BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA+LHH,-LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LHH,LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LHH,LA-LHH

BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LA+LHH,-LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LHH,LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LA-LHH,LA+LHH,LHH,LA-LHH

! Соединения, параллельные Oх

BLOCK,LA+LHH,LC,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,LA+LHH,LC,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH
BLOCK,-LC,-LA-LHH,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH
BLOCK,-LC,-LA-LHH,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH

! Соединения, параллельные Oу

BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,LA+LHH,LC,-LHH,LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,LA+LHH,LC,-LHH,LHH
BLOCK,-LA-LHH,-LA+LHH,-LC,-LA-LHH,-LHH,LHH
BLOCK,LA-LHH,LA+LHH,-LC,-LA-LHH,-LHH,LHH

! Соединения, параллельные Oz

BLOCK,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH,LA+LHH,LC
BLOCK,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,LA+LHH,LC
BLOCK,-LHH,LHH,LA-LHH,LA+LHH,-LC,-LA-LHH
BLOCK,-LHH,LHH,-LA-LHH,-LA+LHH,-LC,-LA-LHH

! Выбираем масштаб для КЭ

LSEL,ALL

LSEL,S,LENGTH,,LH

*IF,LH,GT,LE,THEN

LESIZE,ALL,,NINT(LH/LE)

*ELSE

LESIZE,ALL,,1

*ENDIF

LB = LA-LH

LSEL,S,LENGTH,,LB

*IF,LB,GT,LE,THEN

LESIZE,ALL,,NINT(LB/LE)

*ELSE

LESIZE,ALL,,1

*ENDIF

LBB = LA-LHH

LSEL,S,LENGTH,,LBB

*IF,LBB,GT,LE,THEN

LESIZE,ALL,,NINT(LBB/LE)

*ELSE

LESIZE,ALL,,1

*ENDIF

! Разбиваем на КЭ

MSHK,1 ! Строим сопоставленную сетку
MSHA,0,3D ! Форма элемента – шестигранный элемент
VMESH,ALL ! Генерируем сетку на объемах
NUMMRG,ALL ! Объединяем совпадающие элементы
NUMCMP,ELEM ! Сжимаем нумерацию элементов

! Накладываем контактные элементы

ESEL,ALL

TYPE,3

TSHAP,QUAD ! Контактные элементы – четырехузловые

ESURF ! Генерируем элементы на свободных гранях

! Удаление контактных элементов на гранях куба

NSEL,S,LOC,Z,-LC

NSEL,A,LOC,Z,LC

NSEL,A,LOC,X,-LC

NSEL,A,LOC,X,LC

NSEL,A,LOC,Y,-LC

NSEL,A,LOC,Y,LC

ESLN,R,1

EDEL,ALL

ESEL,ALL

NSEL,ALL

```

! Замена контактных элементов на поверхностные
ESEL,S,TYPE,,3
TYPE,2
MAT,2
REAL,2
EMODIF,ALL
ESEL,ALL

! Вычисляем количество всех элементов
NUMCMP,ELEM
*GET,ELALL_MAX,ELEM,,COUNT
! Вычисляем количество элементов типа 1
ESEL,S,TYPE,,1
*GET,ELL1_MAX,ELEM,,COUNT

! Вычисляем объем всех элементов
ESEL,S,TYPE,,1
current_number = 0
TOTAL_VOLUME = 0
*DO,I,1,ELL1_MAX,1
current_number = ELNEXT(current_number)
*GET,current_volume,ELEM,current_number,VOLU
TOTAL_VOLUME = TOTAL_VOLUME + current_volume
*ENDDO

CUBE_VOLUME = 1
! Значение фактической пористости представительного объема
POR_REAL = (1-TOTAL_VOLUME/CUBE_VOLUME)*100

ESEL,ALL
FINISH

!----- Решение -----
!----- U1 problem (eps_011) -----
/SOLU
ANTYPE,STATIC

! Удаляем ограничения DOF
DDEL,ALL,ALL
DADEL,ALL,ALL

! Выбираем все узлы внешней границы
nset,s,loc,x,-lc
nset,a,loc,x,lc
nset,a,loc,y,-lc
nset,a,loc,y,lc
nset,a,loc,z,-lc
nset,a,loc,z,lc

D,ALL,UY,0
D,ALL,UZ,0

```

```

*GET, JJ, NODE, ,NUM,MIN
*GET,NN_MAX,NODE,,COUNT
*DO,I,1,NN_MAX
  D,JJ,UX,NX(JJ)*EPS_0
  JJ=NDNEXT(JJ)
*ENDDO
NSEL,ALL

```

```

OUTRES,BASIC,ALL
SOLVE
FINISH

```

```

/POST1
ETAB,S11,S,X
ETAB,S22,S,Y
ETAB,S33,S,Z
ETAB,S23,S,YZ
ETAB,S13,S,XZ
ETAB,S12,S,XY
ETAB,V_EL,VOLU

```

```

C1X=0 $ C2X=0 $ C3X=0
C4X=0 $ C5X=0 $ C6X=0

```

```

*do,ii,1,ELALL_MAX
*get,c1x_el,elem,ii,etab,s11
*get,c2x_el,elem,ii,etab,s22
*get,c3x_el,elem,ii,etab,s33
*get,c4x_el,elem,ii,etab,s23
*get,c5x_el,elem,ii,etab,s13
*get,c6x_el,elem,ii,etab,s12
*get,vol_el,elem,ii,etab,v_el

```

```

C1X=C1X+c1x_el*vol_el
C2X=C2X+c2x_el*vol_el
C3X=C3X+c3x_el*vol_el
C4X=C4X+c4x_el*vol_el
C5X=C5X+c5x_el*vol_el
C6X=C6X+c6x_el*vol_el
*enddo

```

```

C11EFF=C1X*VOL_G1 $ C21EFF=C2X*VOL_G1 $ C31EFF=C3X*VOL_G1
C41EFF=C4X*VOL_G1 $ C51EFF=C5X*VOL_G1 $ C61EFF=C6X*VOL_G1
FINISH

```

```

!----- U2 problem (eps_022) -----

```

```

/SOLU
ANTYPE,STATIC

```

```

DDEL,ALL,ALL
DADEL,ALL,ALL

```

! Выбираем все узлы внешней границы

```
nselect,s,loc,x,-lc  
nselect,a,loc,x,lc  
nselect,a,loc,y,-lc  
nselect,a,loc,y,lc  
nselect,a,loc,z,-lc  
nselect,a,loc,z,lc
```

```
D,ALL,UX,0  
D,ALL,UZ,0
```

```
*GET, JJ, NODE, ,NUM,MIN  
*GET,NN_MAX,NODE,,COUNT  
*DO,I,1,NN_MAX  
  D,JJ,UY,NY(JJ)*EPS_0  
  JJ=NDNEXT(JJ)  
*ENDDO  
NSEL,ALL
```

```
OUTRES,BASIC,ALL  
SOLVE  
FINISH
```

```
/POST1  
ETAB,S11,S,X  
ETAB,S22,S,Y  
ETAB,S33,S,Z  
ETAB,S23,S,YZ  
ETAB,S13,S,XZ  
ETAB,S12,S,XY  
ETAB,V_EL,VOLU
```

```
C1X=0 $ C2X=0 $ C3X=0  
C4X=0 $ C5X=0 $ C6X=0
```

```
*do,ii,1,ELALL_MAX  
*get,c1x_el,elem,ii,etab,s11  
*get,c2x_el,elem,ii,etab,s22  
*get,c3x_el,elem,ii,etab,s33  
*get,c4x_el,elem,ii,etab,s23  
*get,c5x_el,elem,ii,etab,s13  
*get,c6x_el,elem,ii,etab,s12  
*get,vol_el,elem,ii,etab,v_el
```

```
C1X=C1X+c1x_el*vol_el  
C2X=C2X+c2x_el*vol_el  
C3X=C3X+c3x_el*vol_el  
C4X=C4X+c4x_el*vol_el  
C5X=C5X+c5x_el*vol_el  
C6X=C6X+c6x_el*vol_el  
*enddo
```

```
C12EFF=C1X*VOL_G1 $ C22EFF=C2X*VOL_G1 $ C32EFF=C3X*VOL_G1
C42EFF=C4X*VOL_G1 $ C52EFF=C5X*VOL_G1 $ C62EFF=C6X*VOL_G1
FINISH
```

```
!----- U3 problem (eps_033) -----
```

```
/SOLU
```

```
ANTYPE,STATIC
```

```
DDEL,ALL,ALL
```

```
DADEL,ALL,ALL
```

```
! Выбираем все узлы внешней границы
```

```
nselect,s,loc,x,-lc
```

```
nselect,a,loc,x,lc
```

```
nselect,a,loc,y,-lc
```

```
nselect,a,loc,y,lc
```

```
nselect,a,loc,z,-lc
```

```
nselect,a,loc,z,lc
```

```
D,ALL,UX,0
```

```
D,ALL,UY,0
```

```
*GET, JJ, NODE, ,NUM,MIN
```

```
*GET,NN_MAX,NODE,,COUNT
```

```
*DO,I,1,NN_MAX
```

```
  D,JJ,UZ,NZ(JJ)*EPS_0
```

```
  JJ=NDNEXT(JJ)
```

```
*ENDDO
```

```
NSELECT,ALL
```

```
OUTRES,BASIC,ALL
```

```
SOLVE
```

```
FINISH
```

```
/POST1
```

```
ETAB,S11,S,X
```

```
ETAB,S22,S,Y
```

```
ETAB,S33,S,Z
```

```
ETAB,S23,S,YZ
```

```
ETAB,S13,S,XZ
```

```
ETAB,S12,S,XY
```

```
ETAB,V_EL,VOLU
```

```
C1X=0 $ C2X=0 $ C3X=0
```

```
C4X=0 $ C5X=0 $ C6X=0
```

```
*do,ii,1,ELALL_MAX
```

```
*get,c1x_el,elem,ii,etab,s11
```

```
*get,c2x_el,elem,ii,etab,s22
```

```
*get,c3x_el,elem,ii,etab,s33
```

```
*get,c4x_el,elem,ii,etab,s23
```

```
*get,c5x_el,elem,ii,etab,s13
```

```
*get,vol_el,elem,ii,etab,v_el
```

```
C1X=C1X+c1x_el*vol_el
```

```
C2X=C2X+c2x_el*vol_el
```

```
C3X=C3X+c3x_el*vol_el
```

```
C4X=C4X+c4x_el*vol_el
```

```
C5X=C5X+c5x_el*vol_el
```

```
C6X=C6X+c6x_el*vol_el
```

```
*enddo
```

```
C13EFF=C1X*VOL_G1 $ C23EFF=C2X*VOL_G1 $ C33EFF=C3X*VOL_G1
```

```
C43EFF=C4X*VOL_G1 $ C53EFF=C5X*VOL_G1 $ C63EFF=C6X*VOL_G1
```

```
FINISH
```

```
!----- U4 problem (eps_023) -----
```

```
/SOLU
```

```
ANTYPE,STATIC
```

```
DDEL,ALL,ALL
```

```
DADEL,ALL,ALL
```

```
! Выбираем все узлы внешней границы
```

```
nset,s,loc,x,-lc
```

```
nset,a,loc,x,lc
```

```
nset,a,loc,y,-lc
```

```
nset,a,loc,y,lc
```

```
nset,a,loc,z,-lc
```

```
nset,a,loc,z,lc
```

```
D,ALL,UX,0
```

```
*GET, JJ, NODE, ,NUM,MIN
```

```
*GET,NN_MAX,NODE,,COUNT
```

```
*DO,I,1,NN_MAX
```

```
  D,JJ,UZ,NY(JJ)*EPS_0/2
```

```
  D,JJ,UY,NZ(JJ)*EPS_0/2
```

```
  JJ=NDNEXT(JJ)
```

```
*ENDDO
```

```
NSEL,ALL
```

```
OUTRES,BASIC,ALL
```

```
SOLVE
```

```
FINISH
```

```
/POST1
```

```
ETAB,S11,S,X
```

```
ETAB,S22,S,Y
```

```
ETAB,S33,S,Z
```

```
ETAB,S23,S,YZ
```

```
ETAB,S13,S,XZ
```

```
ETAB,S12,S,XY
```

```
ETAB,V_EL,VOLU
```

C1X=0 \$ C2X=0 \$ C3X=0
C4X=0 \$ C5X=0 \$ C6X=0

*do,ii,1,ELALL_MAX
*get,c1x_el,elem,ii,etab,s11
*get,c2x_el,elem,ii,etab,s22
*get,c3x_el,elem,ii,etab,s33
*get,c4x_el,elem,ii,etab,s23
*get,c5x_el,elem,ii,etab,s13
*get,c6x_el,elem,ii,etab,s12
*get,vol_el,elem,ii,etab,v_el

C1X=C1X+c1x_el*vol_el
C2X=C2X+c2x_el*vol_el
C3X=C3X+c3x_el*vol_el
C4X=C4X+c4x_el*vol_el
C5X=C5X+c5x_el*vol_el
C6X=C6X+c6x_el*vol_el
*enddo

C14EFF=C1X*VOL_G1 \$ C24EFF=C2X*VOL_G1 \$ C34EFF=C3X*VOL_G1
C44EFF=C4X*VOL_G1 \$ C54EFF=C5X*VOL_G1 \$ C64EFF=C6X*VOL_G1
FINISH

!----- U5 problem (eps_013) -----

/SOLU

ANTYPE,STATIC

DDEL,ALL,ALL

DADEL,ALL,ALL

! Выбираем все узлы внешней границы

nset,s,loc,x,-lc

nset,a,loc,x,lc

nset,a,loc,y,-lc

nset,a,loc,y,lc

nset,a,loc,z,-lc

nset,a,loc,z,lc

D,ALL,UY,0

*GET, JJ, NODE, ,NUM,MIN

*GET,NN_MAX,NODE,,COUNT

*DO,I,1,NN_MAX

D,JJ,UZ,NX(JJ)*EPS_0/2

D,JJ,UX,NZ(JJ)*EPS_0/2

JJ=NDNEXT(JJ)

*ENDDO

NSEL,ALL

OUTRES,BASIC,ALL

SOLVE

FINISH

/POST1

ETAB,S11,S,X

ETAB,S22,S,Y

ETAB,S33,S,Z

ETAB,S23,S,YZ

ETAB,S13,S,XZ

ETAB,S12,S,XY

ETAB,V_EL,VOLU

C1X=0 \$ C2X=0 \$ C3X=0

C4X=0 \$ C5X=0 \$ C6X=0

*do,ii,1,ELALL_MAX

*get,c1x_el,elem,ii,etab,s11

*get,c2x_el,elem,ii,etab,s22

*get,c3x_el,elem,ii,etab,s33

*get,c4x_el,elem,ii,etab,s23

*get,c5x_el,elem,ii,etab,s13

*get,c6x_el,elem,ii,etab,s12

*get,vol_el,elem,ii,etab,v_el

C1X=C1X+c1x_el*vol_el

C2X=C2X+c2x_el*vol_el

C3X=C3X+c3x_el*vol_el

C4X=C4X+c4x_el*vol_el

C5X=C5X+c5x_el*vol_el

C6X=C6X+c6x_el*vol_el

*enddo

C15EFF=C1X*VOL_G1 \$ C25EFF=C2X*VOL_G1 \$ C35EFF=C3X*VOL_G1

C45EFF=C4X*VOL_G1 \$ C55EFF=C5X*VOL_G1 \$ C65EFF=C6X*VOL_G1

FINISH

!----- U6 problem (eps_012) -----

/SOLU

ANTYPE,STATIC

DDEL,ALL,ALL

DADEL,ALL,ALL

! Выбираем все узлы внешней границы

nset,s,loc,x,-lc

nset,a,loc,x,lc

nset,a,loc,y,-lc

nset,a,loc,y,lc

nset,a,loc,z,-lc

nset,a,loc,z,lc

D,ALL,UZ,0

```

*GET, JJ, NODE, ,NUM,MIN
*GET, NN_MAX, NODE, ,COUNT
*DO, I, 1, NN_MAX
  D, JJ, UX, NY(JJ)*EPS_0/2
  D, JJ, UY, NX(JJ)*EPS_0/2
  JJ=NDNEXT(JJ)
*ENDDO
NSEL, ALL

```

```

OUTRES, BASIC, ALL

```

```

SOLVE
FINISH

```

```

/POST1
ETAB, S11, S, X
ETAB, S22, S, Y
ETAB, S33, S, Z
ETAB, S23, S, YZ
ETAB, S13, S, XZ
ETAB, S12, S, XY
ETAB, V_EL, VOLU

```

```

C1X=0 $ C2X=0 $ C3X=0
C4X=0 $ C5X=0 $ C6X=0

```

```

*do, ii, 1, ELALL_MAX
*get, c1x_el, elem, ii, etab, s11
*get, c2x_el, elem, ii, etab, s22
*get, c3x_el, elem, ii, etab, s33
*get, c4x_el, elem, ii, etab, s23
*get, c5x_el, elem, ii, etab, s13
*get, c6x_el, elem, ii, etab, s12
*get, vol_el, elem, ii, etab, v_el

```

```

C1X=C1X+c1x_el*vol_el
C2X=C2X+c2x_el*vol_el
C3X=C3X+c3x_el*vol_el
C4X=C4X+c4x_el*vol_el
C5X=C5X+c5x_el*vol_el
C6X=C6X+c6x_el*vol_el
*enddo

```

```

C16EFF=C1X*VOL_G1 $ C26EFF=C2X*VOL_G1 $ C36EFF=C3X*VOL_G1
C46EFF=C4X*VOL_G1 $ C56EFF=C5X*VOL_G1 $ C66EFF=C6X*VOL_G1
FINISH

```

```

!-----
DEN1 = C11EFF*(C22EFF*C33EFF - C23EFF*C23EFF)
DEN2 = C12EFF*(2*C13EFF*C23EFF - C12EFF*C33EFF)
DEN3 = C13EFF*C13EFF*C22EFF
DEN = DEN1 + DEN2 - DEN3

```

! Вычисление эффективных компонент матрицы податливости

$$S11EFF = (C22EFF * C33EFF - C23EFF * C23EFF) / DEN$$

$$S12EFF = (C13EFF * C23EFF - C12EFF * C33EFF) / DEN$$

$$S13EFF = (C12EFF * C23EFF - C13EFF * C22EFF) / DEN$$

$$S22EFF = (C11EFF * C33EFF - C13EFF * C13EFF) / DEN$$

$$S23EFF = (C12EFF * C13EFF - C11EFF * C23EFF) / DEN$$

$$S33EFF = (C11EFF * C22EFF - C12EFF * C12EFF) / DEN$$

$$S44EFF = 1 / C44EFF$$

$$S55EFF = 1 / C55EFF$$

$$S66EFF = 1 / C66EFF$$

! Эффективные модули Юнга и коэффициенты Пуассона

$$EXEFF = 1 / S11EFF$$

$$EZEFF = 1 / S33EFF$$

$$NUXYEFF = -S12EFF / S11EFF$$

$$NUXZEFF = -S13EFF / S11EFF$$

! Относительные значения

$$rC11 = C11EFF / C11S$$

$$rC12 = C12EFF / C12S$$

$$rC13 = C13EFF / C12S$$

$$rC22 = C22EFF / C11S$$

$$rC23 = C23EFF / C12S$$

$$rC33 = C33EFF / C11S$$

$$rC44 = C44EFF / C44S$$

$$rC55 = C55EFF / C44S$$

$$rC66 = C66EFF / C44S$$

$$rC31 = C31EFF / C12S$$

$$rC32 = C32EFF / C12S$$

$$rEX = EXEFF / ES$$

$$rEZ = EZEFF / ES$$

$$rNUXY = NUXYEFF / NUS$$

$$rNUXZ = NUXZEFF / NUS$$

!----- Вывод в файл -----

! Во время первой итерации цикла создаем файл

! В первой строке записываем названия столбцов

*IF,GLOBAL_INDEX,EQ,1,THEN

 /output,f_r,txt,,

 *VWRITE

 ('Input data: Material __ unit cell')

 *VWRITE

 (' Thickness Porosity K_SS rEX rEZ rC11 rC12 rC13 rC22
rC23 rC33 rC44 rC55 rC66 rNUxy rNUxz Elements')

 /output

 *VWRITE

 (1X)

*ENDIF

/output,f_r,txt,,append

*VWRITE, LH, POR_REAL, K_SS, rEX, rEZ, rC11, rC12, rC13, rC22, rC23, rC33, rC44, rC55,
rC66, rNUXY, rNUXZ, ELALL_MAX

(F12.7, F12.7, F12.1)

/output

FINISH

/CLEAR

*ENDDO

*VWRITE

('***** DONE *****')