

УДК 539.3

ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ КОМПЬЮТЕРНОГО КОНСТРУИРОВАНИЯ НОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

С. В. Панин^{*,**}, Б. А. Люкшин^{*,***,****}, С. А. Бочкарева^{*,***}

* Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055 Томск, Россия

** Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
634050 Томск, Россия

*** Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,
634050 Томск, Россия

**** Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050 Томск, Россия

E-mails: svp@ispms.ru, lba2008@yandex.ru, svetlanab7@yandex.ru

Исследуются проблемы, возникающие при анализе физико-механических свойств композиционных материалов на полимерных матрицах. Обсуждаются структурные особенности таких материалов и обусловленные ими сложности разработки и реализации соответствующих моделей. Предложена методика определения эффективных деформационно-прочностных, теплофизических и электрофизических свойств композиций, а также рассмотрен ряд примеров. Особое внимание уделено решению задач компьютерного конструирования для определения состава и структуры композитов при заданных ограничениях на их эффективные свойства. Исходные данные для решения этих задач получены как в натурных, так и в вычислительных экспериментах. Определены направления дальнейших исследований.

Ключевые слова: эксперимент, многокомпонентные полимерные композиции, эффективные механические характеристики, заданные свойства.

DOI: 10.15372/PMTF20200518

1. Моделирование и конструирование материалов. Проблема создания материалов с заданными свойствами всегда являлась актуальной задачей. В древнем мире эта задача решалась интуитивно, в результате появились такие материалы, как саман — глиняный кирпич, армированный соломой; комбинация рога и древесины, которая использовалась при изготовлении луков. Позднее появился железобетон. Во всех случаях комбинирование различных материалов позволяет придать изделию (конструкции) свойства, не достижимые при использовании его отдельных составляющих [1].

Практически все известные материалы, в том числе считающиеся однородными, имеют сложное строение. В последнее время получила развитие концепция многоуровневого моделирования материалов, впервые сформулированная академиком В. Е. Паниным [2, 3].

Работа выполнена в рамках Государственного задания Института физики прочности и материаловедения СО РАН (код проекта III.23.1.3) и при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ (грант № НШ-2718.2020.8) и Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 20-58-00032 бел.а, 19-38-90106).

© Панин С. В., Люкшин Б. А., Бочкарева С. А., 2020

При таком моделировании анализируются свойства материала на различных масштабных уровнях, причем на каждом из них рассматриваются структурные элементы соответствующих размеров. Это позволило исключить существовавший ранее разрыв между методами анализа свойств материалов в физике твердого тела, когда учитывается кристаллическая структура материала, и методами анализа в механике деформируемого твердого тела, когда материал рассматривается как однородная сплошная среда.

Данный подход имеет различные названия: микромеханика, механика структурно-неоднородных сред, мультимасштабный подход и т. д. Однако наиболее перспективным подходом является физическая мезомеханика материалов [4], которая не ограничивается исследованием процессов на отдельных структурных уровнях [5]. Уже на первом этапе разработки этого научного направления был объяснен ряд явлений, ранее экспериментально обнаруженных при деформировании материалов (возникновение концентраторов напряжений, локализация деформаций в неоднородной среде при различных внешних силовых воздействиях [6]).

При анализе деформационно-прочностных свойств композиционных материалов (композитов), в том числе на полимерных матрицах, требуется учитывать особенности их структуры [7], поэтому был предложен ставший со временем общепринятым термин “состав — структура — свойства”, который характеризует связь между фазовым составом композита, распределением фаз (либо структурным строением) и эффективными физико-механическими свойствами материала.

Композиты являются материалами, для которых характерна сложная многоуровневая структура (см., например, [8]). В работе [9] приведена классификация неоднородностей, характерных для композитов на полимерных матрицах. Так, армирующие включения, независимо от их геометрии (волокнистые или дисперсные наполнители различной формы и размеров) и расположения, являются наиболее крупными образованиями, обуславливающими неоднородность материала. При более детальном анализе обнаруживаются межфазные слои в области контакта матрицы и включений. Сама полимерная матрица также не является однородной, отдельные ее части являются структурированными (кристаллиты) или аморфными. Учет этих особенностей строения материалов в различных масштабах позволил ввести понятие многоуровневости структуры.

При анализе физико-механических свойств композитов возникает два класса задач [10–12]. К первому классу относятся задачи моделирования, в которых заданы свойства и расположение фаз, характер их взаимодействия (так называемые управляющие параметры) и определяются эффективные свойства композита. Вследствие интенсивного развития компьютерных технологий, позволяющих решать большие системы уравнений, в последнее время для расчета эффективных свойств используются численные методы (см., например, [13–15]), основанные на вариационных принципах с последующим осреднением характеристик по представительному объему различными способами.

Ко второму классу относятся задачи конструирования, в некотором смысле являющиеся обратными по отношению к задачам моделирования: эффективные свойства композита заданы, требуется определить управляющие параметры, обеспечивающие заданные свойства материала. Свойства могут быть заданы в виде как односторонних, так и двусторонних ограничений.

Число существующих и создаваемых композиций очень велико. Изменение одного или нескольких параметров, влияющих на состав и структуру материала, может в значительной степени изменить его свойства. Свойства композитов исследуются двумя способами.

Экспериментальные методы, как правило, требуют значительных материальных и временных затрат. Их преимуществом является достоверность получаемых результатов, недостатком — интегральный характер получаемой информации.

Методы моделирования композитов, реализуемые средствами вычислительной механики, позволяют оценивать связи между составом материала, его структурой (управляющими параметрами) и эффективными свойствами, а затем целенаправленно изменять свойства материала. Поскольку большинство полимерных композитов способны выдерживать большие деформации (по сравнению с традиционными конструкционными материалами — металлами и керамиками), анализ напряженно-деформированного состояния следует проводить в геометрически нелинейной постановке. Вид кривой $\sigma \sim \varepsilon$ (напряжение — деформация) свидетельствует о наличии нелинейной зависимости напряжения от деформации. Таким образом, анализ свойств композитов с учетом физической нелинейности возможен при использовании численных методов.

При использовании сеточных методов вычислительной механики (конечно-разностных или конечно-элементных) вследствие многоуровневости структуры материала применение единой сетки невозможно: она либо окажется неприемлемо громоздкой для учета наиболее мелких структурных элементов, либо не будет учитывать их наличие.

С учетом сказанного выше можно сформулировать основные проблемы моделирования и компьютерного конструирования композитных материалов:

- многоуровневость структуры материала, которую необходимо учитывать в предлагаемых моделях и методах их реализации;
- физическая и геометрическая нелинейность деформационно-прочностных характеристик композиций;
- необходимость использования различных конечно-разностных или конечно-элементных сеток для учета многоуровневой структуры материала;
- необходимость построения проблемно ориентированных моделей и разработки способов их реализации с учетом изменения физико-механических характеристик композита в широком диапазоне;
- сложность количественных оценок параметров моделей.

Ниже представлен ряд результатов, полученных с использованием развиваемого авторами данной работы подхода к компьютерному конструированию материалов с заданными свойствами.

2. Управление свойствами полимерных композиций. Существует возможность получения зависимостей различных характеристик материала от управляющих параметров с использованием как экспериментальных, так и вычислительных методов. В работе [12] описаны общие подходы к определению физико-механических свойств материалов на основе вариационных принципов. Наряду со степенью наполнения и средними размерами армирующих включений управляющими параметрами могут служить уровень адгезии (межфазного взаимодействия), форма включений, физико-механические свойства фаз, технологические параметры формования материала и изделий из него и т. д. Данные об эффективных свойствах материала, полученные в вычислительных или натурных экспериментах, являются основой для построения алгоритма конструирования композита, схема которого представлена на рис. 1.

Ниже в качестве примера проводится экспериментально-теоретическая разработка оптимальных составов антифрикционных композиций. Путем выбора наполнителя можно изменять функциональные свойства, в несколько раз повышать сопротивление изнашиванию антифрикционных композитов на основе полимеров. Однако присутствие таких компонентов может приводить к существенному изменению структуры и ухудшению свойств исходного полимера. Необходимо избежать значительного ухудшения его механических и антифрикционных характеристик.

Решается задача проектирования трехкомпонентного композита, состоящего из сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), привитого полиэтилена и полипропилена,

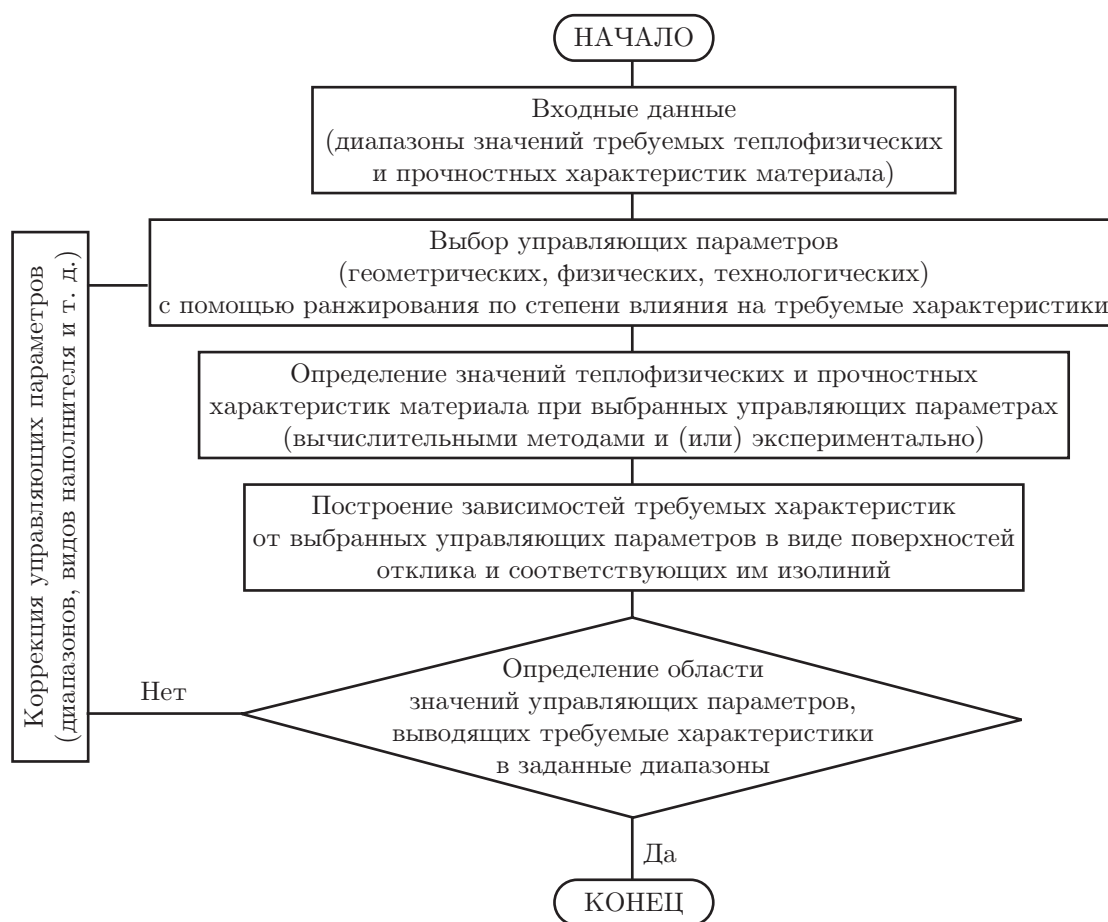


Рис. 1. Блок-схема алгоритма компьютерного конструирования наполненных полимерных композиций

с заданными механическими и триботехническими характеристиками (модуль упругости не менее 800 МПа, величина удлинения до разрушения $\varepsilon_{\text{пн}}$ не менее 200 %, предел текучести не менее 22 МПа, износ по стальному контртелу (вал — колодка) не более 0,05 мм³, показатель текучести расплава не менее 1,3 г/10 мин, ударная вязкость не менее 45 кДж/м²). В этом случае заданные ограничения являются односторонними.

На рис. 2 приведены поверхность управляющих параметров и изолинии на плоскости управляющих параметров, описывающие зависимость ударной вязкости от концентрации наполнителей: полиэтилена ($\varphi_{\text{пэ}}$) и полипропилена ($\varphi_{\text{пп}}$). Эти и приведенные ниже зависимости получены на основе экспериментальных данных. Поскольку ограничения являются односторонними, область требуемых значений управляющих параметров находится по одну сторону от соответствующей изолинии (заштрихованная область на рис. 2–4). В аналогичном виде можно представить зависимости для текучести расплава, модуля упругости, относительного удлинения при разрыве, интенсивности износа и др. Построенные зависимости накладываются друг на друга, пересечение этих областей определяет область управляющих параметров, которые обеспечивают заданные свойства композита (заштрихованная область на рис. 3). Следует отметить, что незначительное изменение некоторых ограничений может оказать существенное влияние на получаемые результаты. На рис. 4 показана область искомых значений, полученная при изменении ограничения на интенсивность износа на 10 % (с 0,050 до 0,055 г/10 мин).

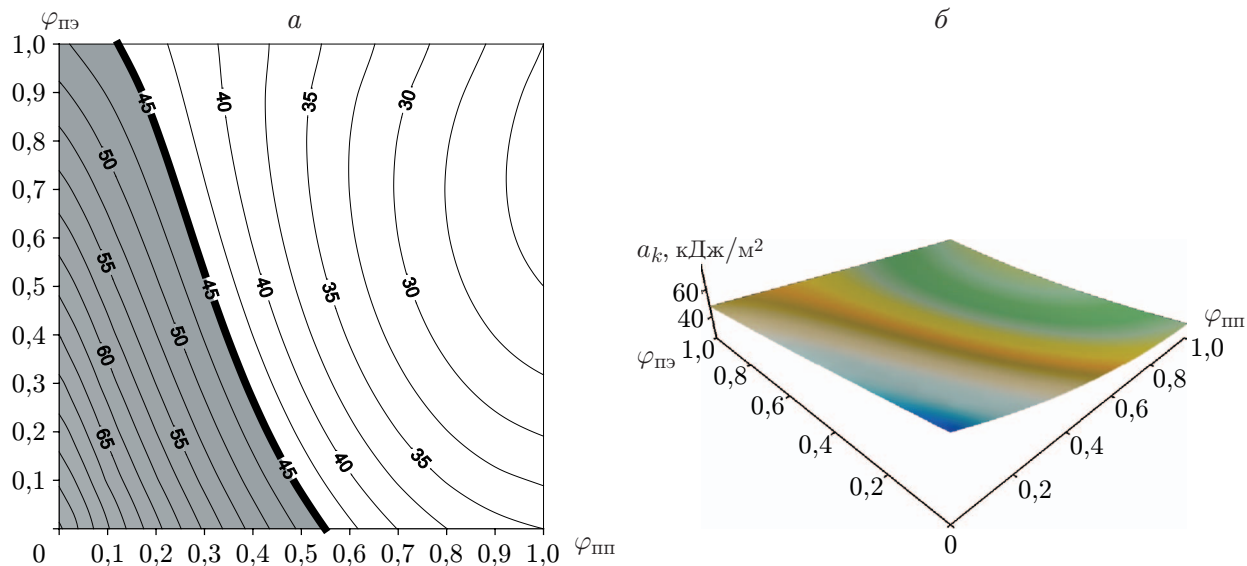


Рис. 2. Зависимость ударной вязкости a_k образцов на основе СВМПЭ от концентрации наполнителей:

a — изолинии ударной вязкости в плоскости $(\varphi_{\text{шп}}, \varphi_{\text{пэ}})$, $б$ — поверхность ударной вязкости в пространстве $(\varphi_{\text{шп}}, \varphi_{\text{пэ}}, a_k)$

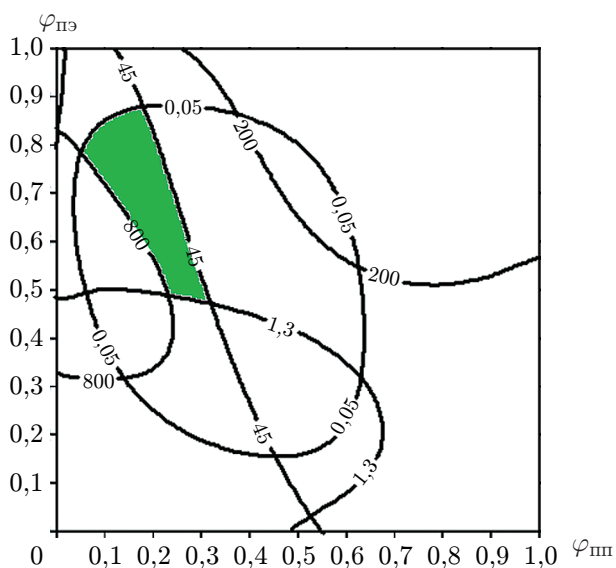


Рис. 3

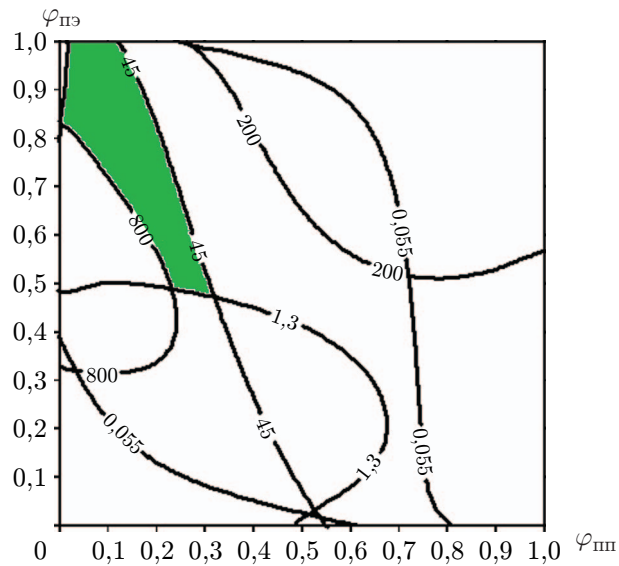


Рис. 4

Рис. 3. Область искомых значений управляющих параметров

Рис. 4. Область значений управляющих параметров при изменении ограничения на интенсивность износа на 10 %

Установлено, что часть ограничений на эффективные свойства материала могут быть неактивными. Это означает, что требования к какой-либо конкретной эффективной характеристике не влияют на положение границы области управляющих параметров, определенной другими характеристиками. Например, на графиках, представленных на рис. 3, 4, неактивны ограничения предела текучести σ_T , так как все его значения больше заданного ограничения снизу $\sigma_T = 22$ МПа. По той же причине ограничение для удлинения до разрушения является неактивным. Возможны также случаи, когда при заданных ограничениях общей области пересечения, соответствующей различным параметрам, не существует. Это означает, что сформулированные требования являются нереализуемыми для материала с выбранным фазовым составом.

Таким образом, конструировать композит с заданными свойствами можно с использованием результатов как вычислительного, так и физического эксперимента. Преимуществами предлагаемого метода решения данной задачи являются наглядность решения и возможность оценки степени влияния тех или иных управляющих параметров на эффективные свойства композита.

Заключение. В результате компьютерного конструирования наполненных композиций определен ряд возникающих при этом проблем. Ниже указаны направления исследований, требующие дальнейшего развития:

- 1) уточнение математических моделей и реализация задач в пространственной (трехмерной) постановке;
- 2) систематизация результатов экспериментальных исследований, позволяющая оптимизировать процедуру компьютерного конструирования материалов;
- 3) уточнение параметров математических моделей;
- 4) обобщение методов компьютерного конструирования на случаи влияния на эффективные свойства композита более трех управляющих параметров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ashby M. F. Materials selection in mechanical design. 4th ed. Burlington: Elsevier, 2011.
2. Егорушкин В. Е., Панин В. Е., Панин А. В. О физической природе пластичности // Физ. мезомеханика. 2020. Т. 23, № 2. С. 5–14.
3. Панин В. Е. Основы физической мезомеханики // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1, № 1. С. 5–20.
4. Панин В. Е. Методология физической мезомеханики как основа построения моделей в компьютерном конструировании материалов // Изв. вузов. Физика. 1995. Т. 38, № 11. С. 6–25.
5. Балохонов Р. Р., Болеста А. В., Бондарь М. П. и др. Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006. (Интеграционные проекты СО РАН; Вып. 8).
6. Panin V. E. Physical mesomechanics of solid surface layers // Phys. Mesomech. 1999. V. 2, N 6. P. 5–21.
7. Markov K. Z. Elementary micromechanics of heterogeneous media. Boston: Birkhäuser, 2000. (Heterogeneous media. Modeling and simulation in science, engineering and technology).
8. Garboczi E. J., Berryman J. G. Elastic moduli of a material containing composite inclusions: Effective medium theory and finite element computations // Mech. Materials. 2001. V. 33. P. 455–470.
9. Люкшин Б. А. Дисперсно-наполненные полимерные композиты технического и медицинского назначения / Б. А. Люкшин, С. В. Шилько, С. В. Панин и др. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2017.

10. **Wang M.** Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials // Materials Sci. Engng. R. 2008. V. 63, iss. 1. P. 1–30.
11. **Mayda M.** An efficient simulation-based search method for reliability-based robust design optimization of mechanical components // Mechanika. 2017. V. 23, N 5. P. 696–702.
12. **Bochkareva S. A., Grishaeva N. Yu., Lyukshin B. A. et al.** A unified approach to determining the effective physicomaterial characteristics of filled polymer composites based on variational principles // Mech. Composite Materials. 2019. V. 54, iss. 6. P. 775–788.
13. **Yang Q. S., Qin Q. H.** Modelling the effective elasto-plastic properties of unidirectional composites reinforced by fibre bundles under transverse tension and shear loading // Materials Sci. Engng. A. 2003. V. 344. P. 140–145.
14. **Würkner M., Berger H., Gabbert U.** On numerical evaluation of effective material properties for composite structures with rhombic fiber arrangements // Intern. J. Engng Sci. 2011. V. 49. P. 322–332.
15. **McDowell D. L., Backman D.** Simulation-assisted design and accelerated insertion of materials // Computational methods for microstructure-property relationships. Boston: Springer, 2011. P. 617–647.

*Поступила в редакцию 29/VI 2020 г.,
после доработки — 29/VI 2020 г.
Принята к публикации 27/VII 2020 г.*
