

Осредненные свойства композита B_4C/Al

Введение. На I-м этапе проекта проводилось трехмерное и двумерное численное моделирование напряженно-деформированного состояния (НДС) дисперсного композита $B_4C/2024Al$ в случае статики. Основной целью исследования было вычисление эффективных упругих модулей композита вычислительным методом.

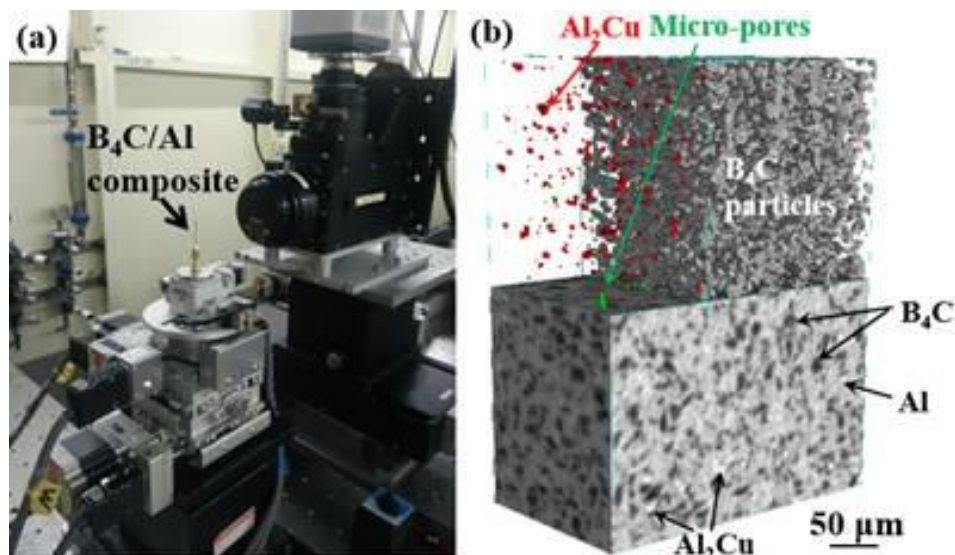


Рис. 1. Изображение дисперсного композита $B_4C/2024Al$ (справа), полученное с помощью томографа (слева)

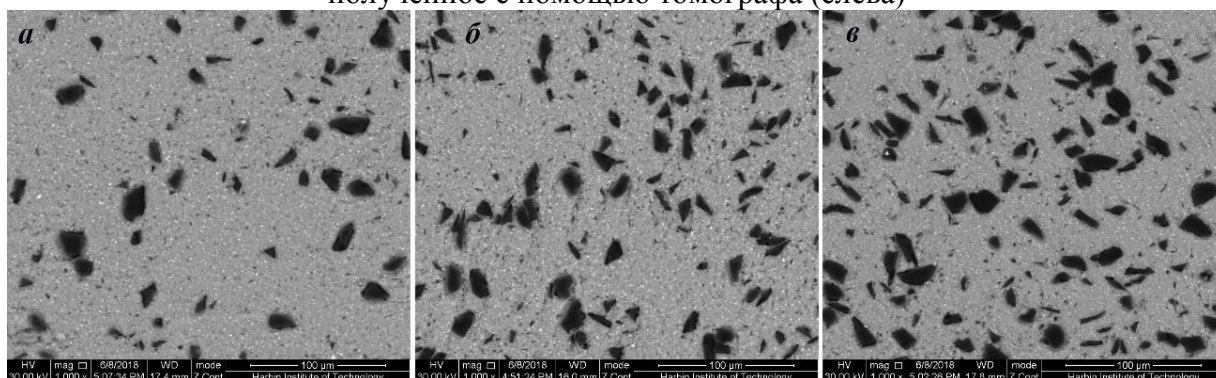


Рис. 2. Фотографии сечений композита $B_4C/2024Al$ (с общей концентрацией карбида бора 9,5% (а), 13,9% (б) и 17,9% (в)), выполненных с помощью растрового электронного микроскопа

Структура композита представляет собой сплав Al с Al_4Cu , в котором равномерно распределены частицы карбида бора (рис. 1, 2). Исследуемые образцы были изготовлены способом плазменно-искрового спекания [1]. Алюминиевые материалы, армированные частицами B_4C , широко используются в различных отраслях промышленности (автомобильной, аэрокосмической, морской, ядерной и т.д.) благодаря своим исключительным свойствам (легкость, прочность, хорошая коррозионная устойчивость и т.д.) и способности противостоять динамическим нагрузкам [2].

На I-м этапе проекта выполнялись следующие задачи:

- 1) Определение эффективных модулей упругости асимптотическим методом осреднения:
→ на основе двумерных моделей реальной структуры композита,

→ на основе трехмерных моделей искусственно созданных структур (в которых включения В₄С представлялись в виде эллипсоидов или цилиндров) и их сечений.

2) Сравнение двумерных и трехмерных расчетов друг с другом и с экспериментальными данными (предоставленными китайскими партнерами). Получение ответа на вопрос: можно ли использовать двумерные модели для оценки эффективных свойств?

3) Анализ зависимости упругих модулей от концентрации В₄С.

На II-м этапе проекта основной задачей является исследование на микроуровне концентрации напряжений в композите В₄С/2024А1 вокруг включений карбида бора (которые имеют угловатую, остроугольную форму) на основе трехмерных изображений реальной структуры, полученных китайским партнером с помощью рентгеновской компьютерной томографии.

Асимптотический метод осреднения. Для вычисления эффективных упругих модулей и концентрации напряжений удобно применять асимптотический метод осреднения [3]. Асимптотический метод осреднения был создан математиками в 1970-х годах в нескольких странах одновременно – во Франции (Е. Sanchez-Palencia), в США и в СССР (Н.С. Бахвалов). Российский ученый Б.Е. Победря был первым механиком, который использовал метод осреднения для расчета модулей упругости композитов [4].

Метод основывается на асимптотическом осреднении уравнения равновесия неоднородной упругой среды:

$$(C_{ijkl}(\vec{x})u_{k,l})_{,j} + f_i(\vec{x}) = 0, \quad \vec{x} \in V.$$

$C_{ijkl}(\vec{x})$ – упругие модули, зависящие от координат, u_k – перемещения, f_i – объемная сила.

Для отражения характера быстрого изменения упругих свойств в композите (в зависимости от координат) вводятся быстрые координаты ξ_i и малый геометрический параметр ε :

$$\xi_i = \frac{x_i}{\varepsilon}, \quad \varepsilon = \frac{l}{L},$$

где l – характерный линейный размер представительной области (RVE), L – характерный линейный размер изучаемого объема композита. Модули упругости композита зависят от быстрых координат:

$$C_{ijkl}\left(\frac{\vec{x}}{\varepsilon}\right) = C_{ijkl}(\vec{\xi}).$$

Решение $\vec{u}(\vec{\xi}, \vec{x})$ имеет гладкую составляющую, на которую наложены высокочастотные флуктуации (это изменения функции перемещений в пределах RVE). Решение задачи представляется в виде асимптотического ряда:

$$u_k(\vec{x}, \vec{\xi}) = v_k(\vec{x}) + \varepsilon N_{kpq}(\vec{\xi})v_{p,q}(\vec{x}) + \dots,$$

$N_{kpq_1\dots q_m}(\vec{\xi})$ – локальные функции быстрых координат, $v_k(x)$ – гладкая составляющая перемещений. Для определения эффективных свойств достаточно первых двух членов ряда.

После подстановки асимптотического представления в уравнение равновесия и последующих преобразований получаем локальную задачу в представительной области для вычисления эффективных упругих модулей:

$$(C_{ijkl}(\vec{\xi})u_{k,l}(\vec{\xi}))_{,j} = 0, \quad \vec{\xi} \in V_{\text{RVE}}$$

со специальным граничным условием на внешней границе модели Σ_{RVE} :

$$u_k = \varepsilon \varepsilon_{kq}^0 \xi_q, \quad \vec{\xi} \in \Sigma_{\text{RVE}},$$

ε_{kq}^0 – постоянные деформации.

В результате решения задачи получаем упругие модули:

$$C_{ij\alpha\beta}^{\text{eff}} = \frac{\langle \sigma_{ij} \rangle}{\langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle} = \frac{\langle \sigma_{ij} \rangle}{\varepsilon_{\alpha\beta}^0}; \quad \langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V_{\text{RVE}}} \int_{V_{\text{RVE}}} \sigma_{ij} dV.$$

Угловые скобки означают осреднение по объему.

Можно сделать вывод, что асимптотическое осреднение является математически строгим методом, который дает общее правило для расчета эффективных упругих модулей и может применяться для любого эллиптического уравнения второго порядка.

2D расчеты на основе реальной структуры композита. Целью работы было исследование точности вычисления эффективных модулей упругости в зависимости от концентрации включений карбида бора на основе двумерных изображений сечений материала путем сравнения результатов расчета с экспериментальными данными. Исследование проводилось на основе оцифрованных фотографий сечений реальной структуры композитов, полученных с помощью электронного микроскопа (рис. 1). При этом использовались два подхода: решались двумерные задачи при плоско-деформированном и плоско-напряженном состояниях в конечно-элементной программе, затем результаты сравнивались.

На рис. 3а показаны граничные условия локальной краевой задачи для определения модуля Юнга в горизонтальном направлении (плоско-напряженное состояние). Верхняя и нижняя границы свободны от напряжений, левая граница не допускает горизонтальных перемещений, на правой границе заданы перемещения в виде линейной функции координат. Эффективный модуль Юнга E_1^{eff} рассчитывается по формуле:

$$E_1^{\text{eff}} = \frac{\langle \sigma_{11} \rangle}{\varepsilon_{11}^0} = \frac{1}{\varepsilon_{11}^0 \cdot l_2} \int_{l_2} \sigma_{11} dl_2.$$

Эффективный модуль Юнга E_2^{eff} в вертикальном направлении определяется аналогично.

На рисунке 3б показаны граничные условия для определения модулей упругости C_{1111}^{eff} и C_{2211}^{eff} (плоско-деформированное состояние). Верхняя, нижняя и левая границы фиксируются в направлении, перпендикулярном соответствующей границе, на правой границе перемещения задаются в виде линейной функции координат. В результате решения этой задачи получаем:

$$C_{1111}^{\text{eff}} = \frac{\langle \sigma_{11} \rangle}{\varepsilon_{11}^0} = \frac{1}{\varepsilon_{11}^0 \cdot l_2} \int_{l_2} \sigma_{11} dl_2; \quad C_{2211}^{\text{eff}} = \frac{\langle \sigma_{22} \rangle}{\varepsilon_{11}^0} = \frac{1}{\varepsilon_{11}^0 \cdot l_1} \int_{l_1} \sigma_{22} dl_1.$$

Интеграл по объему $\langle \sigma_{11} \rangle$ был преобразован в интеграл по границе по формуле Гаусса-Остроградского. Значение интеграла для напряжений σ_{11} вдоль границы l_2 вычислялось при решении задачи в конечно-элементной программе, ε_{11}^0 – постоянные деформации из граничных условий краевой задачи.

Упругие модули C_{2222}^{eff} и C_{1122}^{eff} определяются аналогично.

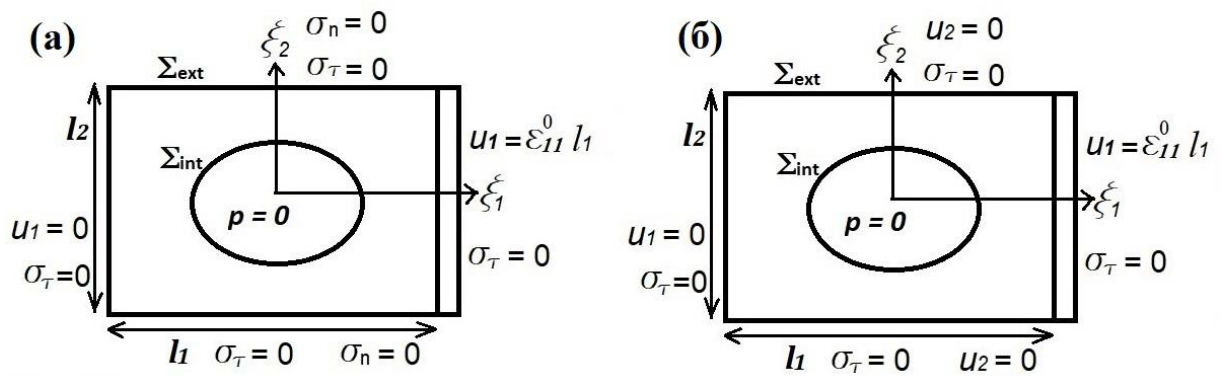


Рис. 3. Граничные условия локальных краевых задач: (а) для определения модуля Юнга E_1^{eff} (плоско-напряженное состояние) и (б) для определения упругих модулей C_{1111}^{eff} и C_{2211}^{eff} (плоско-деформированное состояние)

Для изотропных образцов ($C_{1111}^{eff} = C_{2222}^{eff}$) можно рассчитать эффективные модуль Юнга (E) и коэффициент Пуассона (ν) по формулам теории упругости:

$$C_{\alpha\alpha\alpha\alpha} = \lambda + 2\mu; \quad C_{\beta\beta\alpha\alpha} = \lambda; \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}; \quad E = \mu \cdot 2(1 + \nu).$$

Особенностью исследования стало использование трех масштабов. В композите были выделены два материала:

- 1) матрица, состоящая из Al и мелких включений Al_2Cu и B_4C (размером <1 микрон);
- 2) более крупные включения карбида бора B_4C (размер от 7 до 30 мкм, средний размер – 10–20 мкм).

Осреднение проводилось в два этапа. На первом этапе определялись эффективные модули упругости трехкомпонентной матрицы. На фотографии тонкого сечения дисперсного композита были выбраны две представительные области (RVE) матрицы, они были оцифрованы в программе AutoCAD, затем для них рассчитывались эффективные упругие свойства в конечно-элементной программе (рис. 4). Эффективные свойства компонентов матрицы, принятые в расчетах, приведены в табл. 1.

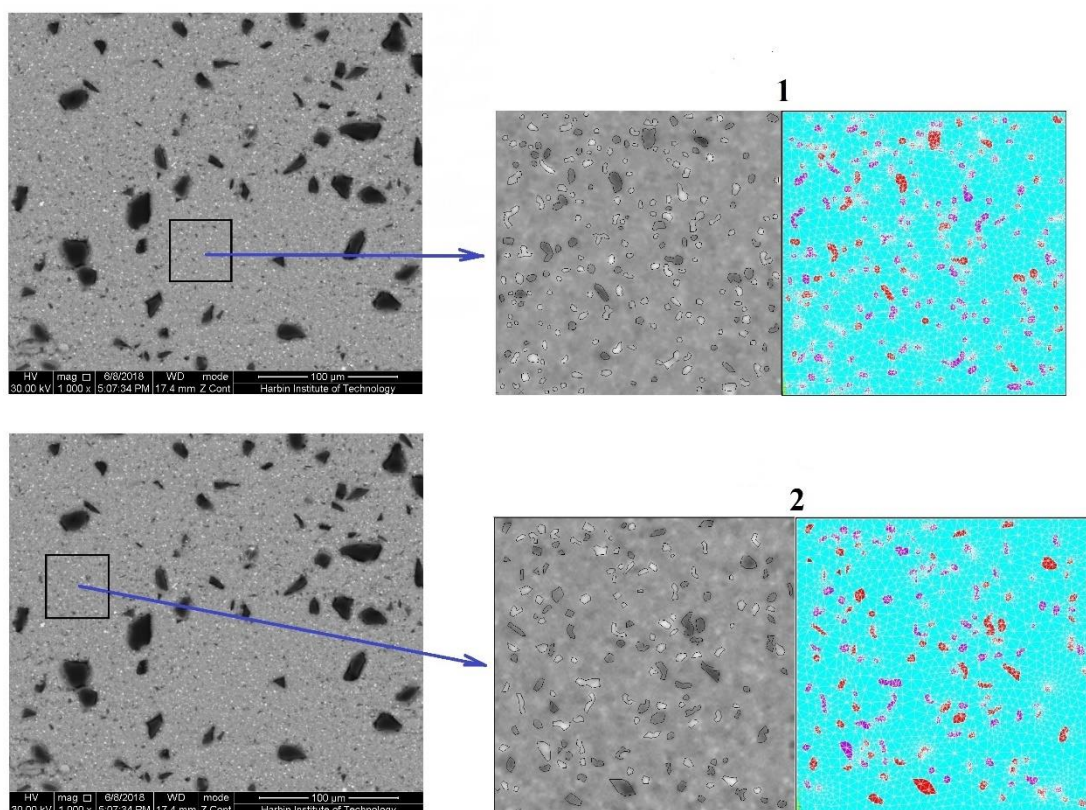


Рис. 4. Создание моделей для расчета эффективных упругих свойств матрицы дисперсного композита. В модели алюминий показан синим цветом, Al_4Cu – фиолетовым, B_4C – красным

Табл. 1.

Упругие модули компонентов матрицы, принятые в расчетах

Химический состав компонента	Цвет на фотографии (в модели)	Содержание компонента в RVE матрицы, %		E, МПа	ν
		1	2		
Al	серый (голубой)	90,7	91,7	69000	0,33
Al_4Cu	белый (фиолетовый)	6,0	4,5	112600	0,32
B_4C	черный (красный)	3,3	3,8	450000	0,16

Результаты расчета эффективных модулей упругости двух RVE матриц при плоско-напряженном и плоско-деформированном состояниях приведены в табл. 2.

Расчеты показали, что матрица является статистически однородной и изотропной (табл. 2). Модули Юнга в направлении горизонтальной и вертикальной осей отличаются менее чем на 1%. Модули Юнга отличаются менее чем на 1% для двух RVE. Значения коэффициента Пуассона одинаковы.

Модули упругости матрицы, определенные при плоско-деформированном и плоско-напряженном состояниях, отличаются менее чем на 1%, что позволяет сделать вывод о достоверности результатов расчета.

Таким образом, на первом этапе были получены эффективные свойства трехкомпонентной матрицы: $E = 74700$ МПа, $\nu = 0,32$, которые будут использоваться для дальнейших расчетов.

Табл. 2.

Результаты расчета эффективных модулей упругости RVE матриц

RVE матриц	Плоско-напряженное состояние				Плоско-деформированное состояние		Разница между $E_{ср}$ и E , %	Разница между E для RVE матриц 1 и 2, %
	$E1$, МПа	$E2$, МПа	Разница между $E1$ и $E2$, %	$E_{ср}$, МПа	E , МПа	ν		
1	74557	74623	0,09	74590	74623	0,32	0,04	0,25
2	74634	74843	0,28	74739	74824	0,32	0,11	

На втором этапе вычислялись эффективные модули композита, состоящего из осредненной матрицы с большими включениями B_4C . Упругие свойства карбида бора для расчета задавались такими же, как и на первом этапе (см. табл. 1). Расчеты проводились для трех композитов с концентрацией крупных включений B_4C 6,3, 10,8 и 14,9%. Общая концентрация B_4C в этих композитах (с учетом содержания B_4C в матрице) составляет 9,5, 13,9 и 17,9% соответственно. На рис. 5 для примера показаны фотографии сечений реальной структуры композита и двухкомпонентных моделей, полученных в результате оцифровки в AutoCAD. Результаты расчетов эффективных свойств представлены в табл. 3. Концентрации B_4C определялись с помощью программы СТИМАН [5].

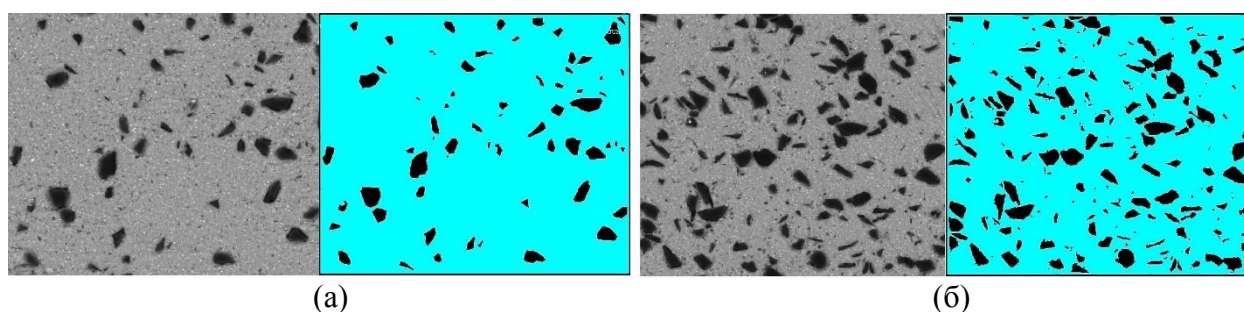


Рис. 5. Фотографии сечений композита $B_4C/2024Al$ и их моделей (концентрация крупных включений B_4C 6,3% (а) и 14,9% (б))

Табл. 3.

Результаты расчета эффективных упругих модулей дисперсных композитов $Al2024/B_4C$ с различным содержанием карбида бора

Общая концентрация B_4C в образцах	Плоско-напряженное состояние				Плоско-деформированное состояние		Разница между $E_{ср}$ и E , %
	$E1$, МПа	$E2$, МПа	Разница между $E1$ и $E2$, %	$E_{ср}$, МПа	E , МПа	ν	
9,5% B_4C	81650	81650	0	81650	81975	0,31	0,40
13,9% B_4C	87080	88213	1,28	87646	88243	0,31	0,68
17,9% B_4C	93729	91813	2,04	92771	93487	0,31	0,77

Расчеты показали, что образцы изотропны (значения модуля Юнга, определенные в горизонтальном и вертикальном направлениях, отличаются не более чем на 2%) (табл. 3). Модули упругости образцов с одинаковой концентрацией карбида бора, вычисленные при плоско-деформированном и плоско-напряженном состояниях, отличаются менее чем на 1%. Это позволяет думать, что рассчитанные значения упругих модулей являются достоверными.

В результате расчетов получена зависимость модуля Юнга дисперсного композита $B_4C/2024Al$ от содержания в нем армирующих частиц карбида бора (рис. 6, 7). Для малых концентраций B_4C (<20%) зависимость является линейной (рис. 6). Однако с увеличением концентрации карбида бора график становится круче (рис. 7). Расчетные значения модуля Юнга близки экспериментальным (рис. 7).

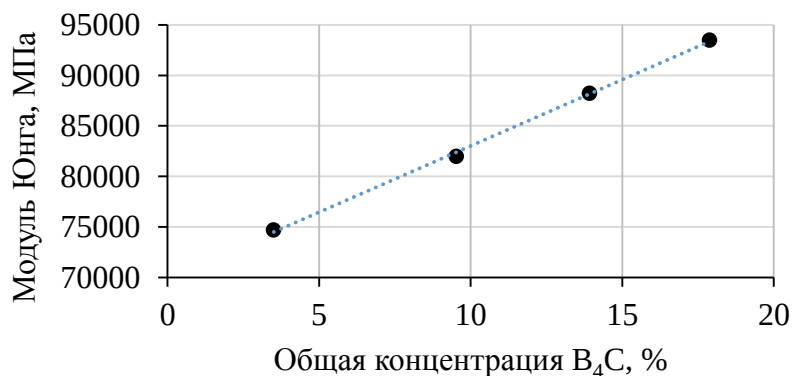


Рис. 6. Зависимость модуля Юнга дисперсного композита $B_4C/2024Al$ от общей концентрации карбида бора по результатам расчетов

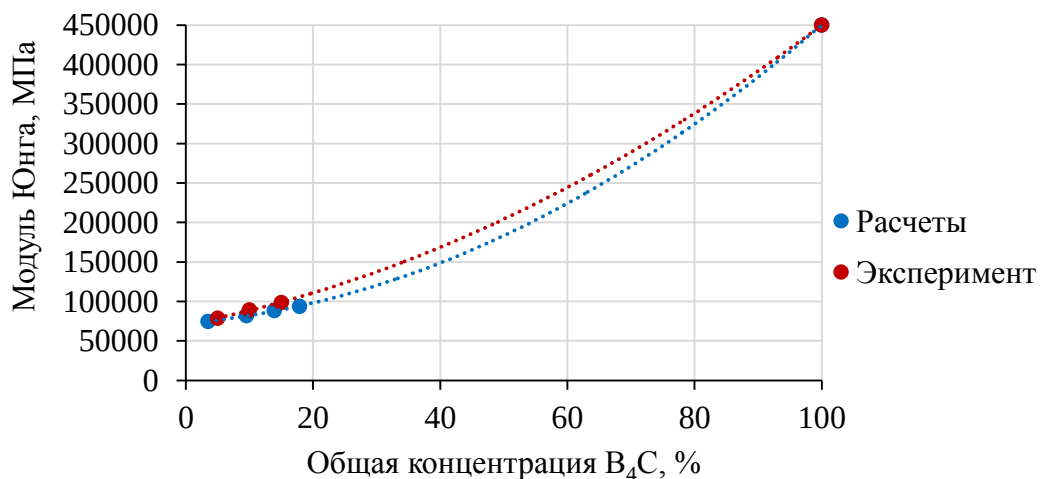


Рис. 7. Зависимость модуля Юнга дисперсного композита $B_4C/2024Al$ от общей концентрации карбида бора по результатам расчетов и экспериментов

3D расчеты на основе модельной структуры композита. Численные эксперименты проводились также для модельных трехмерных структур с включениями в виде цилиндров (рис. 8а) и эллипсоидов (рис. 8б) со случайной ориентацией.

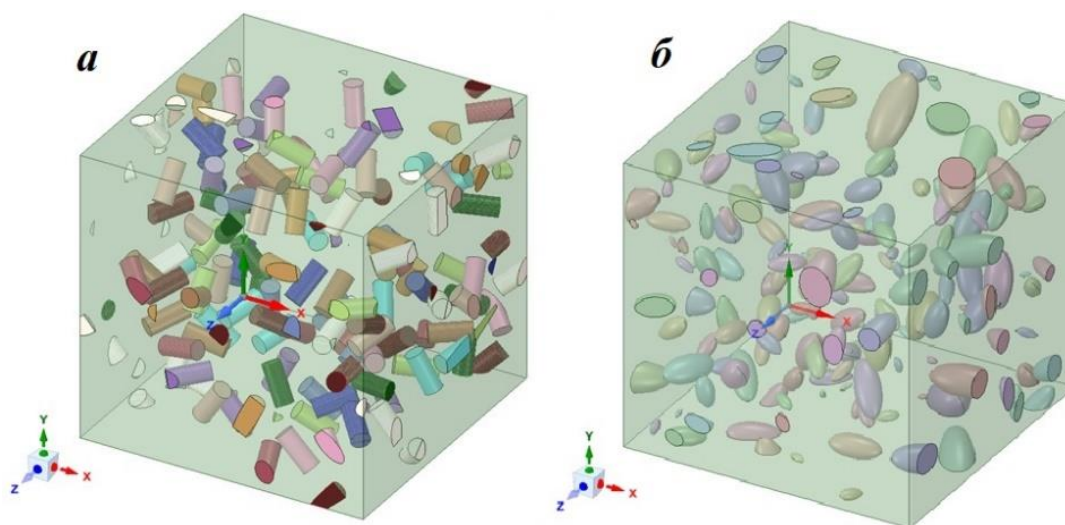


Рис. 8. 3D модели с 5% концентрацией включений карбида бора в виде цилиндров (а) и эллипсоидов (б)

При построении трехмерных моделей использовались следующие критерии эквивалентности с реальной структурой композита. Для моделей с включениями в виде цилиндров – одинаковые объемные концентрации частиц и одинаковые средние размеры частиц (диаметр и длина) (рис. 8а). Для моделей с включениями в виде эллипсоидов – одинаковые объемные концентрации частиц и одинаковые статистические параметры. Последний пункт поясним подробнее (рис. 8б). В плоском сечении реальной структуры композита были выделены три вида крупных частиц B_4C разных размеров и определена концентрация каждого из этих видов частиц в образце. В модели были созданы три вида эллипсоидов разных размеров, причем средние характерные размеры каждого вида эллипсоидов совпадали со средними характерными размерами соответствующего вида включений B_4C в реальной структуре (рис. 8б).

Упругие свойства материалов моделей в расчетах задавались такие же, как и для расчетов реальных структур – для матрицы: $E = 74700$ МПа, $\nu = 0,32$, для B_4C : $E = 450000$ МПа, $\nu = 0,16$.

Для трехмерных моделей с включениями в виде эллипсоидов и цилиндров были рассчитаны модули Юнга (рис. 9) в трех направлениях, а также модули сдвига (рис. 10) и коэффициенты Пуассона (рис. 11) в трех плоскостях для разных концентраций B_4C (5, 10 и 15%). Результаты расчетов для моделей с включениями разной формы (эллипсоидами и цилиндрами) практически совпали, поэтому в дальнейшем будем рассматривать только результаты расчета по моделям с эллипсоидными включениями. Как видно из рис. 9, 10 и 11, модельные структуры изотропны. С увеличением концентрации B_4C значения модулей Юнга и модулей сдвига закономерно растут (рис. 9, 10), а значения коэффициента Пуассона уменьшаются (рис. 11).

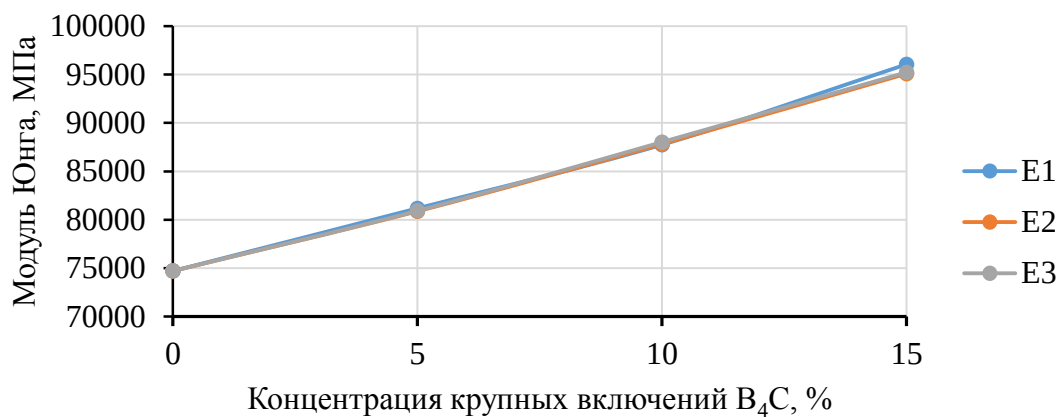


Рис. 9. Зависимость модулей Юнга (вычисленных в разных направлениях) от концентрации карбида бора для модельной структуры с включениями в виде эллипсов

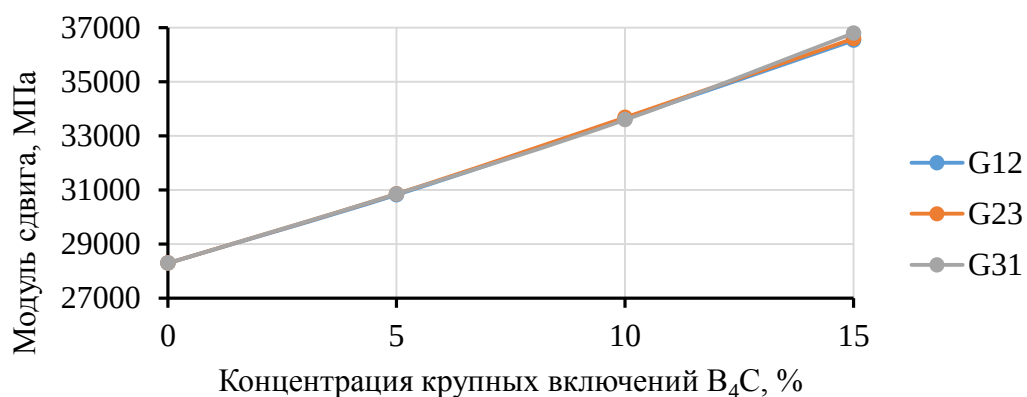


Рис. 10. Зависимость модулей сдвига (вычисленных в разных плоскостях) от концентрации карбида бора для модельной структуры с включениями в виде эллипсов

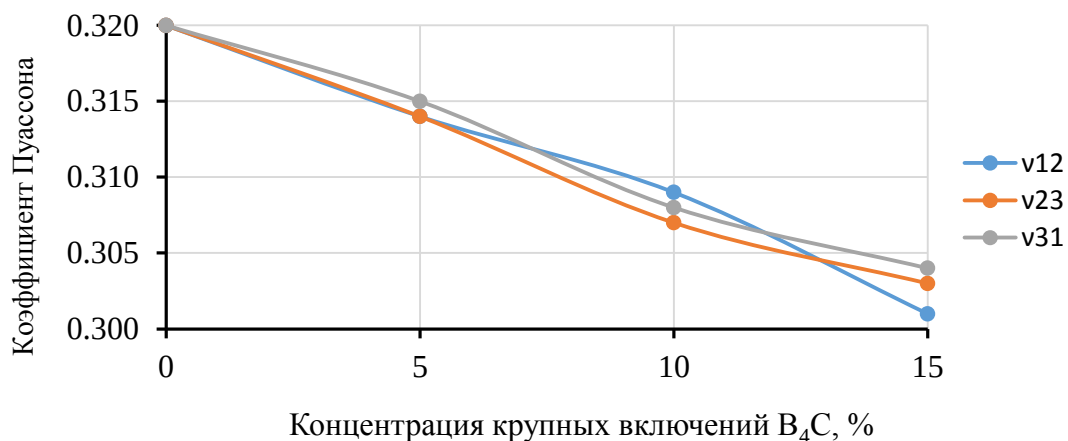


Рис. 11. Зависимость коэффициентов Пуассона (вычисленных в разных плоскостях) от концентрации карбида бора для модельной структуры с включениями в виде эллипсов

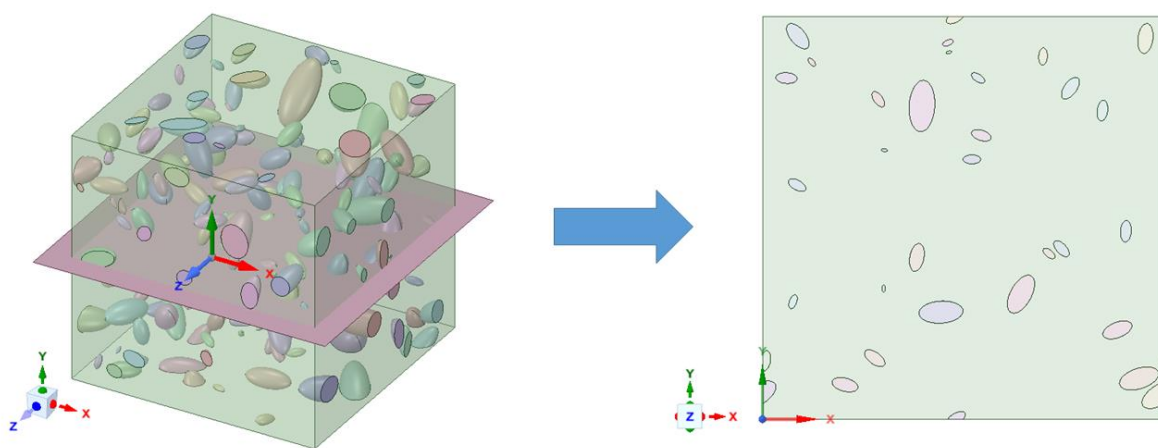


Рис. 12. Построение сечения модельной структуры

Были проведены также расчеты эффективных упругих модулей для сечений модельных структур (рис. 12). При этом выбирались такие плоские сечения, процентная концентрация включений в которых совпадала с ее значением для трехмерной области. Плоская задача решалась численно в двух постановках: для плоско-деформированного и плоско-напряженного состояний.

Табл. 4.

Сравнение численных расчетов с экспериментом

Концентрация B_4C , %		0%	5%	10%	15%
Эксперимент	E , МПа	74 700	78 800	89 200	98 700
3D модель	E , МПа	74 700	80 988	87 865	95 459
	Разница, %	0.0	2.8	1.5	3.3
Плоские деформации	E , МПа	74 700	81 106	85 774	90 908
	Разница, %	0.0	2.9	3.8	7.9
Плоские напряжения	E , МПа	74 700	80 822	85 376	90 362
	Разница, %	0.0	2.6	4.3	8.4

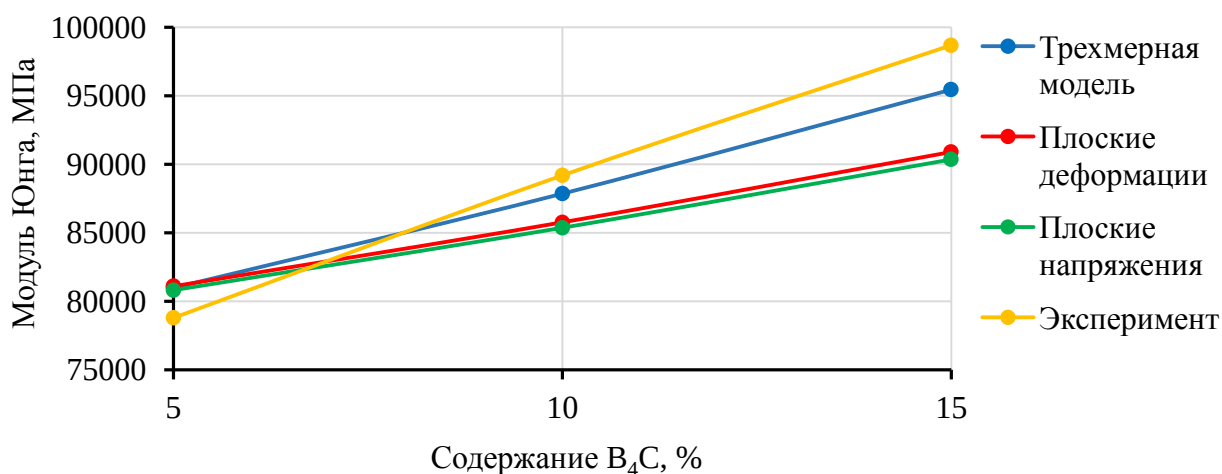


Рис. 13. Сравнение расчетных значений модуля Юнга, вычисленных для трехмерной модельной структуры с включениями в виде эллипсоидов и для ее сечения, с экспериментальными данными.

В табл. 4 и на рис. 13 представлено сравнение результатов трехмерных и двумерных модельных расчетов и экспериментальных данных для реальных структур (предоставленных китайскими партнерами). Значения модуля Юнга, вычисленные для плоских деформаций и для плоских напряжений, практически совпали для одинаковых концентраций B_4C (рис. 13). Сравнение эффективных модулей упругости, рассчитанных для трехмерной модели и ее двумерных сечений, с экспериментальными данными показало хорошее совпадение (рис. 13). Максимальное отклонение расчетных значений модуля Юнга от экспериментальных значений наблюдается при объемной концентрации B_4C 15% и составляет 3% для 3D расчетов и 8% для 2D расчетов (см. табл. 4).

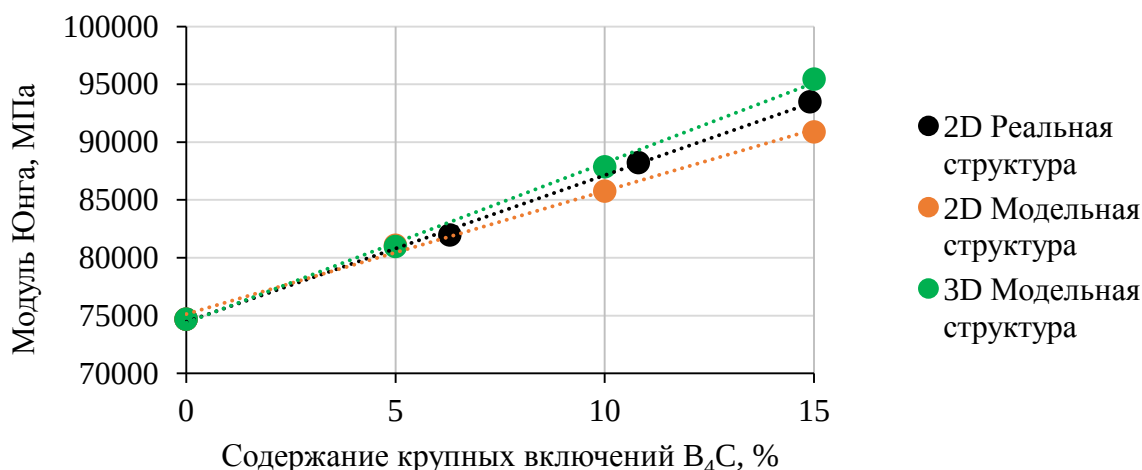


Рис. 14. Сравнение расчетных значений модуля Юнга для реальной и модельной структур композита

Было проведено исследование влияния формы включений карбида бора на упругие свойства композита. Сравнение результатов 2D расчетов реальной и модельной структур показали, что при одинаковых концентрациях B_4C модули Юнга и концентрации напряжений композита с реальными включениями угловатой формы выше, чем с включениями в виде эллипсов (рис. 5). Но различия между значениями модуля Юнга для реальной и модельной структур не превышают 3% (рис. 14).

Общие выводы. В работе представлено применение асимптотического метода осреднения для определения эффективных упругих модулей дисперсных композитов с использованием двумерных изображений реальной структуры. Значения модуля Юнга, рассчитанные для плоских деформаций и плоских напряжений, практически совпадают друг с другом для одинаковых концентраций B_4C . Это позволяет сделать вывод о достоверности результатов расчетов.

Модельная трехмерная структура использовалась для сравнения эффективных упругих модулей, вычисленных с использованием локальной трехмерной задачи, с модулями, вычисленными в плоских задачах. Максимальная относительная разница достигает 5% при объемном соотношении B_4C около 15%. Таким образом, расчеты подтверждают возможность использования двумерных изображений микроструктуры для расчета эффективных модулей изотропного (на макроуровне) композита.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-51-53006.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Huiling Jin, Shisheng Li, Qiubao Ouyang.* Fabrication of Double-Layer 2024Al-2024Al/B4C Composite by Plasma Activated Sintering and Its Mechanical Properties // *Engineering Science*. 2017. Vol. 2. No. 1. P. 1–4.
2. *Wang K., Li X., Li Q., Shu G., Tang G.* Hot deformation behavior and microstructural evolution of particulate-reinforced AA6061/B4C composite during compression at elevated temperature // *Materials Science & Engineering A*. 2017. Vol. 696. P. 248–256.
3. *Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П.* Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1984. 352 с.
4. *Победря Б.Е.* Механика композиционных материалов. М.: Изд-во МГУ, 1984. 336 с.
5. *Соколов В.Н., Юрковец Д.И., Разгулина О.В., Мельник В.Н.* Программно-аппаратный комплекс для исследования микроморфологии поверхности твердых тел по РЭМ-изображениям // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 1998. № 1. С. 33–41.

ПЛАНЫ и ЗАДЕЛ на 2020 г.

Основной целью исследования является вычисление концентрации напряжений в дисперсном композите на микроуровне. Трехмерные изображения структуры были предоставлены китайской стороной во время встречи в Харбинском институте технологии в сентябре 2019 года.

В самое последнее время удалось получить оцифрованное трехмерное изображение и соответствующую конечно-элементную сетку с помощью немецкой компании VGStudio, являющейся мировым лидером в данной области. Следует отметить, что возможность построения трехмерной сетки появилась в самой последней версии их продукта только в этом году.

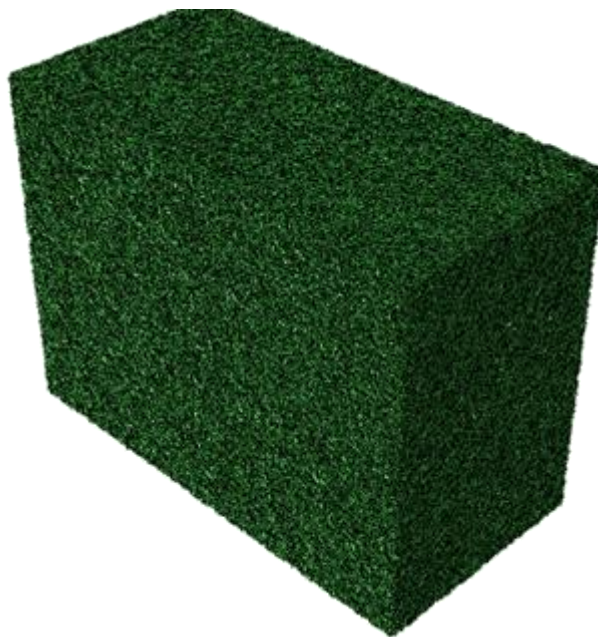


Рис. 15. Общий вид трехмерного оцифрованного изображения представительного объема композита B4C/Al, полученного в рентгеновской установке.

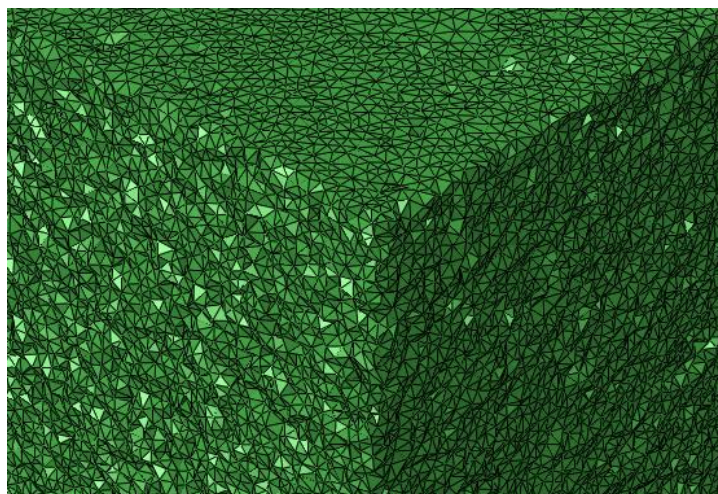


Рис. 16. Укрупненный вид поверхности образца.

В настоящее время проводится работа по получению трехмерной структуры композита для решения локальных задач (задач на микро уровне) и вычисления концентрации напряжений вблизи включений карбида бора и, как следствие, эффективных модулей для косвенной проверки вычислений. Проблема получения цифрового трехмерного изображения существенно сложнее получения двумерного изображения. В настоящий момент проводится исследование оцифрованного изображения, полученного с помощью программы VGStudio MAX. Последняя версия 3.3 данной программы позволяет получать не только трехмерное изображение, но и конечно-элементную сетку. Последнюю можно использовать в различных конечно-элементных программах, в том числе и в собственной программе. Согласно предложению из этой немецкой компании возможно сотрудничество для дальнейшего развития продукта с целью автоматического получения качественной сетки для дисперсных композитов. Изображения сетки, полученные на данный момент, приведены на рис. 15, 16.