

На правах рукописи

УДК: _____

Левандовский Андрей Николаевич

**МОДЕЛИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ПОРИСТЫХ
КЕРАМИЧЕСКИХ СТРУКТУР**

Специальность: 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Санкт-Петербург

2017

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Для уменьшения загрязнения окружающей среды постоянно повышаются требования к качеству очистки отработанных газов. Ведущие мировые разработчики высокотехнологичной и промышленной керамики стремятся обеспечить производителей автотранспортных средств и стационарных силовых установок качественными керамическими носителями для фильтрующих элементов.

Наиболее важными характеристиками структур, используемых для фильтрации выхлопных газов, являются:

- устойчивость к высокотемпературным воздействиям;
- устойчивость к повышенным температурным градиентам;
- устойчивость к внешним механическим воздействиям;
- низкое гидравлическое сопротивление.

Механические свойства поликристаллических материалов, применяющихся для производства фильтров, недостаточно изучены. Эти материалы почти всегда существуют в пористом виде, и, кроме того, наиболее перспективные керамики содержат температурные микротрещины (из-за ортотропии КТР кристаллов). Наличие пор и микротрещин затрудняет экспериментальные исследования эффективных свойств на микроуровне. Разработке аналитических и эмпирических моделей для исследования термомеханических свойств пористых структур посвящено множество работ. Наиболее актуальные результаты исследований, близких по теме к настоящей работе, опубликованы следующими авторами: Качанов, Наседкин, Шевцова, Димитриенко, Матвиенко, Морозов, Кривцов, Пшеничный, Разина, Савченко, Семенов, Сергеева, Штерн, Смолин, Салганик, Pabst, Koudelka, Hutchings, Ortiz, Bazant, Shyam, Hasselman.

Актуальность темы подтверждается тем, что выполнение настоящего исследования спонсировалось компанией Корнинг в рамках проектов по созданию сажевых фильтров нового поколения AT Dura Trap.

Цель исследования

Целью исследования является разработка и реализация комплексного подхода (учитывающего одновременно геометрические и физические параметры объекта) к моделированию свойств пористых керамических структур, который позволит прогнозировать термомеханические свойства этих структур в зависимости от размеров и формы пор, температурных и механических свойств составляющих фаз.

Задачи исследования

- 1) Разработка моделей, основанных на данных компьютерной микротомографии, позволяющих определять эффективные термомеханические характеристики однофазных пористых структур.
- 2) Разработка метода моделирования многофазных пористых материалов с микротрещинами.

- 3) Исследование конечно-элементной (КЭ) сходимости задач определения эффективных линейных характеристик образцов, а также задач о разрушении образцов, на сетках, состоящих из одинаковых КЭ кубической формы.
- 4) Получение статистических данных по расчетным параметрам различных структур.
- 5) Вывод обобщающих теоретических и эмпирических соотношений, позволяющих без использования метода конечных элементов (МКЭ) предсказывать термомеханические параметры существующих и перспективных пористых структур.
- 6) Сравнение полученных численных результатов с известными экспериментальными данными.

Методы исследования

Чтобы избежать изготовления сплошных (непористых) образцов материалов, представляющих интерес для исследования, в работе используется температурно-механическое моделирование. В комбинации с экспериментами томографии и нейтронной дифракции, моделирование дает возможность неразрушающего анализа материала и оптимизации его структуры.

В работе используются методы теории упругости, механики разрушения и вычислительной механики. В качестве основного инструмента исследования свойств пористых структур применяется МКЭ.

Используются теоретические выкладки и эмпирические обобщения экспериментальных и численных результатов.

Для подтверждения и корректировки полученных численных решений используется сравнение с существующими результатами экспериментов (четырёхточечный изгиб, нейтронная дифракция, электронная томография).

Научная новизна работы заключается в результатах исследования и использовании данных объемной томографии и нейтронной дифракции – экспериментов, которые сравнительно недавно получили промышленное распространение.

- 1) Впервые детально разработаны и применены методы моделирования
 - линейных упругих и температурных эффективных свойств
 - механического разрушения
 - температурного микрорастрескиванияодно- и многофазных пористых структур с температурными микротрещинами на сетках одинаковых КЭ кубической формы на основании данных объемного томографического сканирования.
- 2) Для проведения адекватного термомеханического анализа разработаны методы оценки разрешения томограмм на основе:
 - прямых КЭ вычислений;
 - анализа диаграмм послойной плотности (без применения МКЭ);
 - данных о характерном размере пор, формирующих структуру твердых частиц или включений (без применения МКЭ).
- 3) Уточнены коэффициенты связей, описанных в литературе:

- эффективного модуля упругости и пористости:

$$\frac{E_i^{eff}}{E^{mat}} = (1 - p)^{m_i}, \quad (1)$$

где E_i^{eff} – эффективный модуль упругости образца в направлении “i”;

E^{mat} – модуль упругости материала образца на микроуровне;

p – пористость образца;

m_i – показатель морфологии пористой структуры в направлении “i”;

- эффективного модуля упругости и эффективного коэффициента теплопроводности для однофазного пористого материала:

$$\ln\left(\frac{k_i^{eff}}{k^{mat}}\right) = C \cdot \ln\left(\frac{E_i^{eff}}{E^{mat}}\right), \quad (2)$$

где E_i^{eff} , k_i^{eff} – эффективные модуль упругости и коэффициент теплопроводности образца в направлении “i”;

E^{mat} , k^{mat} – модуль упругости и коэффициент теплопроводности материала образца на микроуровне (осредненные по направлениям для случая ортотропных кристаллов).

4) Получены соотношения, позволяющие прогнозировать термомеханические параметры пористых структур без использования МКЭ, описывающие:

- связи микро- и макроскопических величин в эксперименте нейтронной дифракции (7–8);
- связь эффективного модуля упругости и эффективного коэффициента теплопроводности материала, состоящего из ортотропных кристаллов (2).

5) Впервые предложена и применена зависимость критерия удаления КЭ от размера КЭ (4) для того, чтобы избежать зависимости результатов моделирования разрушения от размера КЭ.

6) Впервые предложен и использован метод прямого вычисления объёмной плотности микротрещин.

Достоверность полученных результатов обоснована строгостью математических выкладок, корректностью численных моделей, малым отличием между результатами моделирования, аналитическими расчетами и экспериментальными данными, как оригинальными, так и известными из открытых публикаций.

Положения, выносимые на защиту

- 1) КЭ численные модели микропористого материала, построенные по данным объемной томографии.
- 2) Метод определения разрешения трехмерного томографического сканирования пористых структур, необходимого и достаточного для построения численных моделей по данным томографии.
- 3) Результаты КЭ расчета эффективных термомеханических свойств образцов керамики.
- 4) Эмпирические зависимости, полученные и уточненные на основании статистически значимого количества численных экспериментов.
- 5) Дополнение метода обработки данных экспериментов нейтронной дифракции.

Практическая значимость исследования

Результаты исследования, в том числе построенные КЭ модели используются в компании Корнинг для ускорения работы по поиску составов и процессов изготовления пористых керамических структур, оптимальных для изготовления фильтров выхлопных газов.

Апробация работы

Основные положения были представлены и обсуждались на следующих международных конференциях и семинарах:

научные семинары в Научном Центре Корнинг, 2007-2013, Санкт-Петербург;

Monday Morning Modeling Meeting, 2007, Корнинг, США;

Corning European Technology Center Exploratory Research Review, 2007, Фонтенбло, Франция;

Monday Morning Modeling Meeting, 2009, Корнинг, США;

Corning European Technology Center Environmental Technology Research Review, 2009, Фонтенбло, Франция;

Microstructure modeling meeting, 2009, Корнинг, США;

Corning Environmental Technology Research Review, 2010, Корнинг, США;

Third International Conference on Porous Media and its Applications in Science, Engineering and Industry, 2010, Монтекатини, Италия;

Microstructure Fundamentals Summit, 2011, Корнинг, США;

International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials, 2011, Квебек, Канада;

36th International Conference & Exposition on Advanced Ceramics and Composites, 2012, Дайтона, США;

Modeling Symposium, 2012, Корнинг, США;

Scientific Conference Week of Science in SPbSPU, 2014, Россия;

39th International Conference & Exposition on Advanced Ceramics & Composites (invited), 2015, Дайтона, США.

Публикации

По данному направлению автором опубликованы 7 статей, в том числе три – в зарубежных журналах из перечня Scopus [3-5], одна – в зарубежном

журнале из перечня Chemical Abstracts [6] и две – в российских журналах из перечня ВАК [1;2].

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех основных разделов, заключения, списка литературы из 127 наименований и приложений. Основной текст изложен на 221 листах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении сформулированы цели и задачи исследования, обоснована актуальность решаемых задач; описана научная новизна, приведено краткое содержание диссертационной работы.

В первом разделе проведены обзор и анализ литературных источников, близких по теме исследований к выполненным в данной работе.

Во втором разделе приведено общее описание исследуемых материалов и образцов, а также описаны численные и экспериментальные методы, имеющие отношение к рассматриваемым в диссертации задачам.

Поскольку большая часть работы посвящена компьютерному моделированию, рассматриваются в основном виртуальные образцы, цифровые двух- или трехмерные массивы данных. В работе используется понятие «воксель» – элемент объемного изображения, представляющий значение какой-либо величины на регулярной сетке в трехмерном пространстве. Предполагается, что воксели имеют кубическую форму и заполнены тем или иным материалом в соответствии с данными компьютерной томографии. Причем размер вокселя (длина ребра куба) численно равен разрешению томограммы. Таким образом, данные томографии представляют собой описание набора вокселей с указанием позиций их центров в пространстве и кода материала, заполняющего каждый воксель. Численная модель получается прямой конвертацией исходных вокселей, соответствующих твердым фазам, в конечные элементы.

Рассматриваются сгенерированные структуры пересекающихся сферических пор или твердых частиц, а также структуры, сгенерированные на основе данных томографии (кордиерит, Al_2O_3 , АТ, SiC). Пористость всех структур лежит в диапазоне 0,30...0,65, разрешение – 1...5 мкм, медиальный размер пор D50 – 5...22 мкм. Все образцы имеют формы прямоугольных параллелепипедов. Под осями образца понимается система координат, определяемая нормальными к граням (рис.1а). Выбраны граничные условия в перемещениях для того, чтобы детально моделировать разрушение материала за пределом прочности:

$$E_i^{eff} = \frac{\sigma_i^{eff}}{\varepsilon_i^{eff}} = \frac{R_i \cdot l_i}{S_i \cdot u_i}, \quad (3)$$

где σ_i^{eff} – нормальная компонента тензора напряжений образца без учета микроструктуры в направлении “i”;

ε_i^{eff} – нормальная компонента тензора деформаций образца без учета микроструктуры в направлении “i”;

E_i^{eff} – эффективный модуль упругости образца в направлении “i”;

R_i – реакция опоры при растяжении образца в направлении “i”;

l_i – изначальный размер образца в направлении “i”;

S_i – площадь поперечного сечения образца ортогонально оси “i”;

u_i – перемещение в направлении оси “i”, приложенное к соответствующей грани образца (рис. 1б).

В качестве иллюстрации модельного подхода рассмотрена задача о кубе со сферическим вырезом (рис. 1в). Показано, что эффективные модули на традиционной и воксельной сетках сходятся к одному значению.

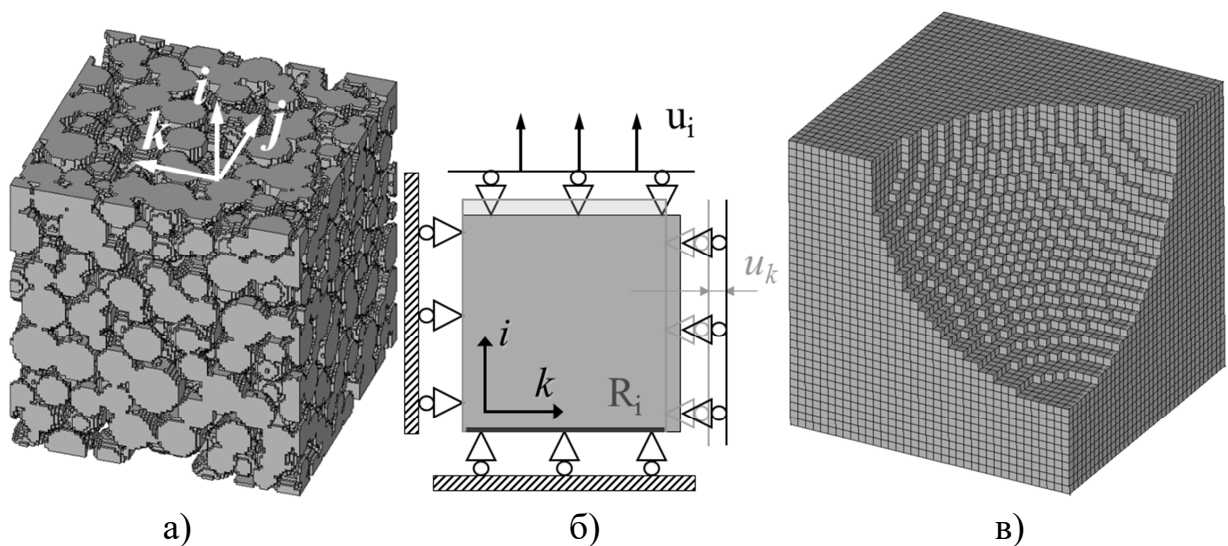


Рис. 1. Оцифрованная структура пересекающихся сферических частиц (а) и граничные условия, используемые для определения эффективных механических модулей образцов (б)

С целью оптимизации вычислений разработан алгоритм закругления воксельной сетки для случаев, когда численная модель имеет избыточное разрешение.

При моделировании многофазных материалов, состоящих из ортотропных кристаллических доменов, используется та же кубическая сетка с присвоением каждому элементу соответствующих свойств. Подробнее процесс моделирования многофазных материалов с микротрещинами описан в разделе 4.5.

Разрушение моделируется путем удаления (обнуления свойств) КЭ из модели. Используются два алгоритма удаления КЭ.

В первом алгоритме решается последовательность линейных задач, для каждой следующей из которых нагрузка масштабируется таким образом, чтобы условие выполнения критерия разрушения было достигнуто в одном элементе, при этом свойства одного или нескольких наиболее напряженных элементов обнуляются, и задача решается заново. Нагрузка снова масштабируется, и т.д. В разделе 3.4 выясняется, насколько обосновано обнуление свойств не одного, а сразу нескольких элементов за один шаг для ускорения процесса получения результата.

Второй алгоритм удаления КЭ предусматривает решение задачи с пошаговым увеличением нагрузки. После каждого шага удаляются все элементы, удовлетворяющие выбранному критерию разрушения. Далее задача решается заново без увеличения нагрузки, и снова элементы, удовлетворяющие выбранному критерию, удаляются из модели. Когда элементов, которые нужно удалить, не остается, нагрузка вновь увеличивается, и так далее. Зависимость результатов от величины шага по нагрузке описана в разделе 3.4.

В настоящей работе использованы данные экспериментов ртутной порометрии (пористость и размер пор образцов), компьютерной микротомографии (геометрия структур), дифракции отраженных электронов (фазовый состав и размер доменов многофазных структур).

Проведено сравнение результатов численного моделирования с результатами экспериментов с нейтронной дифракцией на одноосно сжатых образцах и с четырехточечным изгибом.

В третьем разделе описано механическое моделирование образцов без учета температурного микроагрессивирования.

Решен ряд линейных задач для определения E^{eff} различных структур: семи искусственных структур пересекающихся сферических пор или частиц (в трех направлениях) и двух натуральных образцов кордиерита (в одном направлении).

Проанализировано распределение конечных элементов в одном из образцов кордиерита по величине локальной деформации. Приведены результаты расчетов, обосновывающих выбор в данном исследовании критерия первой главной деформации в качестве критерия разрушения (удаления конечного элемента).

С использованием выбранного критерия ε^1 промоделировано разрушение при растяжении и сжатии нескольких образцов кордиерита на разных сетках с постепенно уменьшающимся линейным размером элемента. Показано, что значение критерия ε^* удаления конечного элемента должно зависеть от размера элемента r следующим образом:

$$\varepsilon^* \sim \frac{1}{r^\lambda}, \quad (4)$$

где λ – показатель сингулярности, соответствующий геометрии структуры в непосредственной окрестности удаляемого КЭ, может принимать значения в диапазоне 0,455...0,500.

Получены данные по среднему значению $\langle \lambda \rangle$ для моделируемых структур. Значения лежат в диапазоне 0,455...0,497.

На основании анализа изменения ε^* в зависимости от λ в диапазоне 0,455...0,497, для сравнительного моделирования был использован постоянный (для всех удаляемых элементов) показатель $\lambda = 0,5$. Показано, что хотя использование постоянного показателя не дает возможности исследовать сходимость решения задачи о разрушении при стремлении размера конечного элемента к нулю, однако для исследуемых массивов томограмм и искусственных структур позволяет сравнивать результаты решения задач о разрушении при стремлении размера конечного элемента к минимальным значениям, используемым на практике.

Определение абсолютного значения критерия первой главной деформации ε_0 для базового КЭ с длиной ребра r_0 рассмотрено в разделе 6.

Проведено исследование сеточной сходимости для линейных задач об определении E^{eff} . Результаты исследования сеточной сходимости для линейных задач также актуальны для моделирования разрушения, так как при выбранном подходе моделирование разрушения происходит путем последовательного решения большого количества линейных задач.

Предложен быстрый (не требующий КЭ расчетов) метод оценки качества оцифровки пористых структур по диаграммам послойной плотности. Анализ диаграмм послойной плотности для одной и той же структуры, представленной в различных (смоделированных) разрешениях, позволяет сделать вывод об оптимальном разрешении сканирования или об оптимальном размере элемента, выбранного для вычисления механических параметров структуры. Выводы, полученные при анализе диаграмм, подтверждаются детальным КЭ исследованием сеточной сходимости и достаточности разрешения томографического сканирования.

Промоделировано разрушение при нагружении в различных направлениях следующих образов:

- пересекающиеся сферические поры (4 шт.);
- сферические частицы (3 шт.);
- томографические структуры титаната алюминия (30 шт.);
- кордиерита (3 шт.);
- оксида алюминия (1 шт.);
- карбида кремния (1 шт.).

Для всех образцов получены кривые напряжений-деформаций и значения эффективных модулей упругости, пределов прочности и деформационных пределов. Расчеты проведены для различных направлений.

Проведено сравнение данных моделирования с данными экспериментов четырехточечного изгиба и нейтронной дифракции. Для интерпретации экспериментов нейтронной дифракции в дополнение к известным формулам, предложенным М. Качановым, связывающим осредненные микроскопические величины:

$$E^{mat} = \frac{\langle \sigma_i^{mat} \rangle}{\langle \varepsilon_i^{mat} \rangle} \quad (5)$$

$$\frac{\langle \sigma_i^{mat} \rangle}{\sigma_i^{eff}} = (1 - p)^{-1} \quad (6)$$

выведены следующие соотношения:

$$\frac{\langle \varepsilon_i^{mat} \rangle}{\varepsilon_i^{eff}} = (1 - p)^{m_i - 1} \quad (7)$$

$$\frac{\langle \varepsilon_j^{mat} \rangle}{\langle \varepsilon_i^{mat} \rangle} = -\nu^{mat} \quad (8)$$

где E^{mat} – модуль упругости материала образца на микроуровне;

$\langle \sigma_i^{mat} \rangle$ – осредненная по объему образца нормальная компонента тензора напряжений материала на микроуровне в направлении “i”;

$\langle \varepsilon_i^{mat} \rangle$ – “i”;

p – пористость образца;

m_i – показатель морфологии пористой структуры в направлении “i”;

ν^{mat} – коэффициент Пуассона материала образца на микроуровне.

Отношение компонент тензора напряжений зависит лишь от пористости (6), отношение компонент тензора деформаций зависит еще и от морфологии пор – m (7). Отношение осредненных по всему объему пористого образца микродеформаций в осевом и трансверсальном направлении, равняется коэффициенту Пуассона материала скелета, взятому с обратным знаком (8).

По результатам моделирования в данном разделе сформулирован ряд выводов, относящихся преимущественно к материалам без микротрещин.

1) В двух сериях проведенных расчетов для структур пересекающихся пор и твердых частиц результаты оказались идентичными для всех направлений (с разницей менее 1 %).

- 2) Получено подтверждение зависимости эффективного модуля пористой структуры от пористости (1)
- 3) Отношение предела прочности на сжатие к пределу прочности на растяжение равно 2,5(для $m = 4,0-4,2$)–3,2(для $m = 2,0$). Предельные деформации во всех случаях также больше при сжатии (в среднем в 2,8 раза).
- 4) Вычисленные E^{eff} , дифракционные осевой и трансверсальный модули близки к данным эксперимента нейтронной дифракции для образца оксида алюминия Al_2O_3 (10 %) и карбида кремния SiC (5 %).
- 5) Отношения осевого (в направлении экструзии образцов) и радиального (в направлении, ортогональном оси экструзии) модулей упругости и пределов прочности для образцов титаната алюминия близки к экспериментальным значениям (разница составляет менее 10 %).
- 6) Пористые структуры исследуемой керамики имеют большие деформационные пределы при большей пористости.
- 7) Значение эффективного модуля упругости и пределов прочности в осевом направлении превышает его значение в радиальном направлении в среднем на 30 % в случае сферических и на 90–100 % (почти в 2 раза) в случае вытянутых пороформирующих частиц. Процесс экструзии (при полной изотропии частиц на входе) приводит к 30 % анизотропии на выходе, при этом изначально ориентированные произвольным образом частицы экструзия ориентирует преимущественно в одном направлении.
- 8) Экструзия оказывает влияние на предельные деформации, которые образец способен выдержать без потери прочности. Значения деформаций, соответствующих наибольшему напряжению, в целом увеличиваются при уменьшении модуля упругости и предела прочности.
- 9) В случае нагружения в более податливом направлении, процесс разрушения более постепенный, предельные напряжения и деформации могут в несколько раз превышать значения, соответствующие моменту возникновения первой трещины.
- 10) Для большинства структур, особенно при пористости $p > 50$ %, а также для больших m , деформации, которые структура способна выдержать до полного разрушения, существенно (на 30–100 % и больше) превышают так называемый деформационный предел – деформацию, соответствующую наибольшему напряжению, которое структура способна выдержать при силовом нагружении
- 11) Для случайных структур сферических пор и твердых частиц представительность в пределах $\pm 5-10$ % сохраняется, пока линейный размер образца превышает диаметр пор в 15–20 раз.

В четвертом разделе приведено описание и обоснование применяемых в работе подходов к моделированию температурного микрорастрескивания, приведены результаты моделирования материалов с микротрещинами и выполнено сравнение с экспериментальными данными.

После прогрева (в процессе обжига керамики при высоких температурах), на начальном этапе остывания (от 1400 °С до 1000 °С) происходит формирование доменной структуры. Домен – это область, внутри

которой ориентации кристаллов совпадают с некоторой точностью. В ходе дальнейшего остывания вплоть до комнатной температуры из-за разности коэффициентов температурного расширения в разных направлениях и для разных фаз возникают температурные напряжения и микротрещины.

В работе для моделирования однофазного материала используются структуры одинаковых ортотропных кубических доменов, ориентированных вдоль трех ортогональных направлений (рис. 2а). Проводится сравнение кривых $E^{\text{eff}}(T)$, полученных с использованием моделей доменов в форме кубов и объемных вороновских ячеек (рис. 2б, 3б).

Температурно-механическая модель включает в себя возможность моделирования возникновения и закрытия температурных микротрещин.

Разработан метод оценки предельного значения нормирующей величины в критерии разрушения КЭ на основании сравнения результатов моделирования микрорастрескивания на КЭ модели пористой доменной структуры с экспериментом, при котором значение критерия ε^* (предельное значение нормы ε^1) определяется для одного образца и далее используется для моделирования не только температурных, но и механических процессов на аналогичных образцах. При этом предельное значение для критерия T^* (или ε^*) может быть найдено в зависимости от наличия соответствующих экспериментальных данных двумя способами:

- по данным о пороговом значении размера домена, при котором температурные микротрещины отсутствуют;

- по результатам сравнения модельных и экспериментальных кривых $E(T)$.

Пример оценки критерия ε^* показан на рисунке 3а. Использование найденного описанным методом значения ε^* приводит к минимальной погрешности (менее 1%) в определении эффективного модуля упругости рассматриваемого материала с микротрещинами (кордиерита) при комнатной температуре (рис. 3а, 4), а также к реалистичным значениям для предела прочности пористого кордиерита. Наблюдается также хорошее совпадение по микроскопическим параметрам (рис. 4).

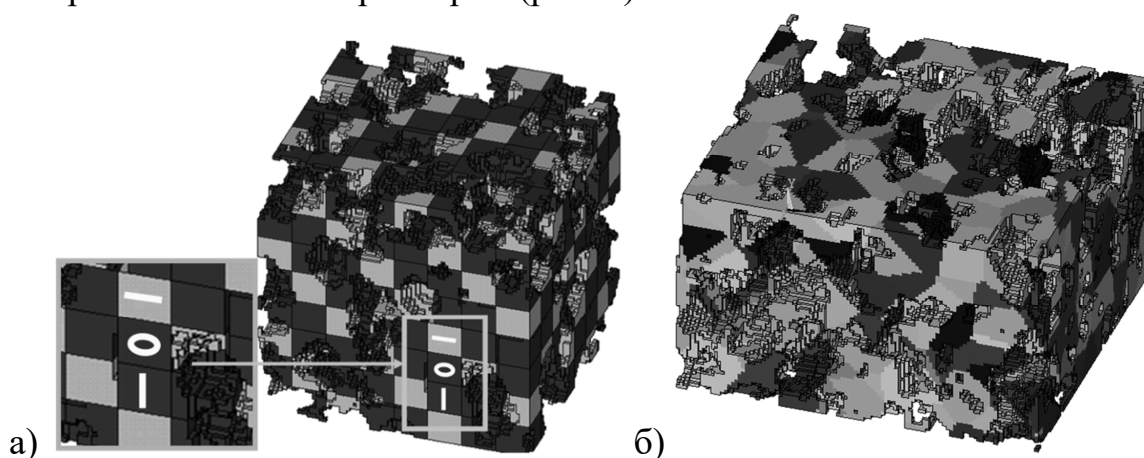


Рис. 2. Структура доменов: а) кубической формы; б) формы вороновских ячеек в объеме

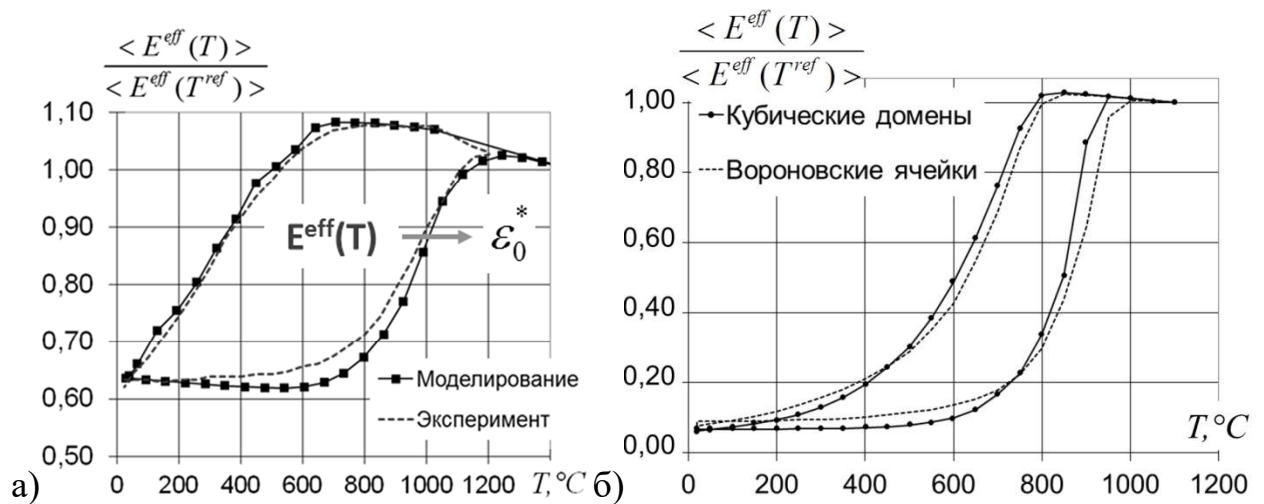


Рис. 3. а) Определение критерия разрушения элемента ε^* при сравнении модельной и экспериментальной кривой $E^{eff}(T)$; б) Зависимости $E^{eff}(T)$ для структур с кубическими доменами и с доменами в форме вороновских ячеек

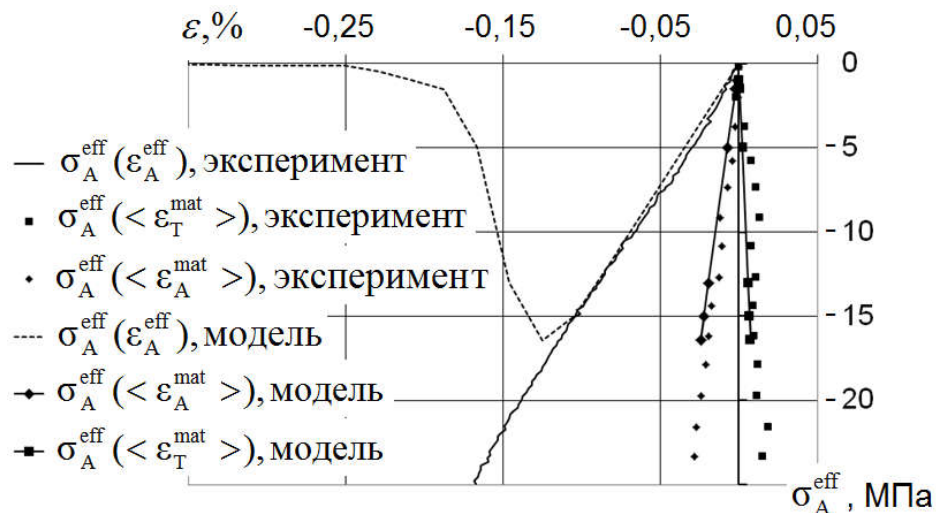


Рис. 4. Результаты моделирования кривой $\sigma_A^{eff}(\varepsilon_A^{eff})$ и дифракционных модулей кордиерита в сравнении с экспериментальными данными

На основании результатов моделирования материалов с микротрещинами сформулированы следующие выводы.

- 1) Форма модельных кривых $E^{eff}(T)$ совпадает с экспериментальной, наблюдаются полностью аналогичные тенденции при изменении свойств и размеров доменов.
- 2) Модельные кривые $E^{eff}(T)$ полностью совпадают с кривыми, полученными на доменах другой формы (вороновских ячейках), как по форме кривых, так и по абсолютным значениям модуля упругости во всем диапазоне температур.
- 3) Структуры доменов и микротрещин изотропны (по результатам сравнения данных КЭ анализа эффективной прочности и упругости образцов без микротрещин и образцов разной степени микрорастрескивания).

- 4) Структура доменов кубической формы представительна при количестве доменов большем, чем 83.
- 5) Описанный подход позволяет моделировать трехфазные материалы с микротрещинами (промоделировано влияние свойств различных фаз на процесс разрушения трехфазной структуры на основе титаната алюминия).
- 6) Впервые предложен прямой метод вычисления индекса микрорастрескивания.

В пятом разделе рассматривается связь эффективного модуля упругости и эффективного коэффициента теплопроводности однофазного пористого материала. На основании результатов более чем шестисот численных экспериментов уточнены коэффициенты эмпирической зависимости (2).

Показано, что $C = 0,70$ для изотропного скелета и $C = 0,58$ для доменной структуры ортотропного скелета пористой структуры.

Проведено сравнение полученных коэффициентов с данными, найденными в открытых источниках (рис. 5).

Значение $C = 0,70$ для изотропного скелета наиболее близко к значению $C = 0,75$ (Pabst, 2005). Однако Pabst при вычислении коэффициента C использовал заданные постоянные значения для морфологического показателя m в моделях зависимости E^{eff} и k^{eff} от пористости. То есть модель, предложенная Pabst'ом имеет ограничения по применимости значительно более существенные в сравнении с моделью, предложенной в настоящей работе. Закономерность для структур, состоящих из ортотропных доменов, приведена впервые.

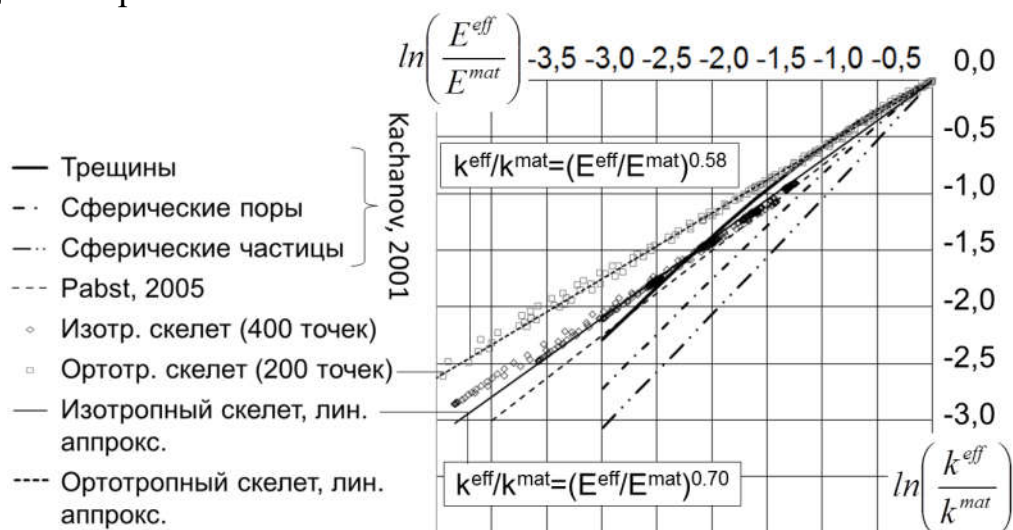


Рис. 5. Связь модуля упругости и коэффициента теплопроводности пористых структур с различной морфологией, пористостью, степенью температурной поврежденности

Таким образом, подтверждено существование связи между изменением эффективного упругого модуля и эффективным коэффициентом теплопроводности пористой структуры, причем коэффициент C , соответствующей линейной зависимости, не зависит от:

морфологии структуры (формы пор, показателя m);
пористости;
количества микротрещин;
рассматриваемого материала (в случае изотропного скелета).

В заключении представлены основные результаты и выводы исследования:

- 1) Разработан комплексный подход, позволяющий прогнозировать изменения термомеханических свойств пористых керамических структур при изменении геометрических и физических входных параметров (размеров и формы пор, температурных и механических свойств составляющих фаз).
- 2) При вычисления эффективных модулей упругости и коэффициентов теплопроводности пористых образцов по данным томографии, размер вокселя должен быть меньше медианного размера пор, формирующих материал основных частиц или включений. Показано, как для определения оптимального разрешения могут быть использованы диаграммы послойной плотности, построение которых не требует ресурсоемких КЭ расчетов.
- 3) При моделировании разрушения методом удаления КЭ, значение критерия удаления КЭ (ϵ^*) должно масштабироваться обратно пропорционально размеру КЭ в степени 0,455–0,500 (4). Для сравнительного анализа в большинстве случаев следует выбрать число из указанного диапазона и работать с ним при условии, что размер КЭ изменяется не более чем на порядок. Такой выбор значения критерия ϵ^* при использовании совместно с КЭ моделями, состоящими из одинаковых КЭ кубической формы, на макроуровне позволяет избежать сеточных зависимостей, обычно наблюдаемых при моделировании разрушения удалением КЭ.
- 4) Показано, что абсолютное значение критерия удаления КЭ (ϵ^*) может быть определено на основании сравнения результатов моделирования температурного микрорастрескивания на КЭ модели пористой доменной структуры (кривой $E^{\text{eff}}(T)$) с экспериментом для одного образца и далее может использоваться для моделирования не только температурных, но и механических процессов в аналогичном материале.
- 5) Процесс экструзии оказывает положительное влияние на эффективные термомеханические свойства материала, увеличивая деформационные пределы в направлениях основных температурных градиентов. Это увеличение особенно заметно при использовании вытянутых пороформирующих частиц.
- 6) Использование материалов с увеличенной пористостью ($p > 50\%$) перспективно с точки зрения улучшения не только гидродинамических но и термомеханических свойств фильтра: увеличение пористости приводит к увеличению деформационных пределов, стойкости к температурным нагрузкам.
- 7) Уточнены коэффициенты связей эффективного модуля упругости с пористостью (1) и эффективным коэффициентом теплопроводности (2). Выведены формулы (7), (8), применяемые для определения показателя формы пор m_i и коэффициента Пуассона материала скелета по данным НД.

8) Для структур пересекающихся пор или твердых частиц образцы, линейный размер которых более чем в 10 раз превышает средний медианный размер формирующих частиц или пор (D50), можно считать представительными. В случае, если форма формирующих частиц или пор сложнее сферической, размер образца должен превышать D50 по крайней мере в 15–20 раз.

Основное содержание диссертации отражено в следующих публикациях автора:

1. Левандовский, А.Н. Моделирование пористого материала методом конечных элементов / А.Н. Левандовский, Б.Е. Мельников, А.А. Шамкин // Строительство уникальных зданий и сооружений. – 2017. – № 2 (53). – С. 61–77.
2. Левандовский, А.Н. Моделирование разрушения пористого материала / А.Н. Левандовский, Б.Е. Мельников, А.А. Шамкин // Инженерно-строительный журнал. – 2017. – № 1 (69). – С. 3–22.
3. Bruno, G. Connecting the macro- and microstrain responses in technical porous ceramics: modeling and experimental validations / G. Bruno, A.M. Efremov, A.N. Levandovskiy, B. Clausen, J. Mater // Journal of Materials Science. – 2011. – Vol. 46, No. 1. – P. 161–173.
4. Bruno, G. Thermal and Mechanical Response of Industrial Porous Ceramics / G. Bruno, A.M. Efremov, A.N. Levandovskiy, I. Pozdnyakova, D.J. Hughes, B. Clausen // Materials Science Forum. – Trans Tech Publications, 2010. – Vol. 652. – P. 191–196.
5. Levandovskiy, A.N. Macro to micro stress and strain conversion in porous ceramics / A.N. Levandovskiy, A.M. Efremov, G. Bruno // Materials Science Forum. – 2012. – Vol. 706. – P. 1667–1672.
6. Levandovskiy, A.N. Finite element modeling of porous material structure represented by a uniform cubic mesh / A.N. Levandovskiy, B.E. Melnikov // Applied Mechanics and Materials. – 2015. – Vol. 725. – P. 928–936.