

УДК 620.22:51-72

Е.Н. КНЯЗЕВА, канд. техн. наук

Государственный комитет по науке и технологиям Республики Беларусь, г. Минск

В.А. КУКАРЕКО, д-р физ.-мат. наук; В.Ю. АЛЕКСАНДРОВ; Н.П. ТИМОШЕНКО

Объединенный институт машиностроения НАН Беларуси, г. Минск

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ. ПОДХОДЫ, МЕТОДИКИ, ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА

*Выполнен обзор и анализ основных подходов, в рамках которых осуществляется применение метода конечных элементов к исследованию композиционных материалов: теоретические разработки, непосредственный расчет представительных объемов композитов с применением универсальных компьютерных пакетов, а также использование специализированных программных средств. Показаны преимущества, недостатки, ограничения и перспективы применения различных подходов при исследовании механических свойств композиционных материалов. Рассмотрен опыт применения моделирования на базе метода конечных элементов при совершенствовании свойств композиционных материалов и объяснении процессов, происходящих на микроуровне.*

**Ключевые слова:** композиционный материал, моделирование, метод конечных элементов, микроструктура, ячейки Вороного, представительный объем

**Введение.** В современной промышленности технический прогресс во многом определяется степенью развития знаний и технологий в области получения и исследования свойств новых материалов, преимущественно композиционных. Это связано с тем, что использование композитов дает наиболее широкое пространство для варьирования и совершенствования свойств конструкции в целом за счет изменения характеристик материалов. В то же время успешная реализация данного подхода в значительной степени зависит от уровня развития научных знаний о процессах, происходящих в структуре композитов.

Механика композитов как наука является одной из наиболее динамично развивающихся. Начиная с 70-х годов прошлого века, наблюдается интенсификация исследований в области теоретического описания поведения материалов на базе математических моделей. Но, как показывает практика, по мере увеличения количества учитываемых особенностей моделируемого материала, значительно усложняется математический аппарат соответствующих моделей. В связи с этим сформировалось новое направление в исследовательской практике ученых-материаловедов, базирующееся на применении численных методов и компьютерного моделирования при расчете свойств материалов на микроуровне. Математической основой для него стал преимущественно метод конечных элементов, суть и базовые соотношения которого достаточно полно рассмотрены в работе [1].

Целью статьи является анализ основных тенденций и достижений в области применения численного моделирования на базе метода конечных элементов при исследовании свойств композиционных материалов на микроуровне, выработка рекоменда-

ций по использованию определенных методик и подходов, исходя из микроструктуры исследуемого материала и программно-аппаратных средств, имеющихся в распоряжении научного работника.

На сегодняшний день решение задач механики композиционных материалов с применением метода конечных элементов осуществляется в рамках трех основных подходов:

- теоретические исследования в области адаптации формулировок и соотношений метода конечных элементов, позволяющие учесть особенности микроструктуры композиционных материалов;
- непосредственный расчет напряженно-деформированного состояния представительных объемов композитов с применением универсальных компьютерных пакетов;
- применение специализированных программных средств.

Исследованию достижений ученых в рамках каждого из трех обозначенных подходов посвящен отдельный раздел статьи. В заключительном, четвертом разделе, рассмотрен опыт применения компьютерного моделирования и расчета методом конечных элементов при описании свойств, процессов деформирования и разрушения композиционных материалов, а также достигнутые научно-практические результаты.

**Теоретические разработки в области адаптации формулировок и соотношений метода конечных элементов, позволяющие учесть особенности микроструктуры композиционных материалов.** Основной проблемой, с которой сталкиваются исследователи при решении задач механики композиционных материалов путем моделирования и расчета методом конечных элементов — большой размер моделей, что обусловлено необходимостью построения детального

разбиения у границ включений для более точного моделирования микроструктуры материала. В итоге при расчете таких моделей значительно возрастают затраты компьютерного времени и ресурсов.

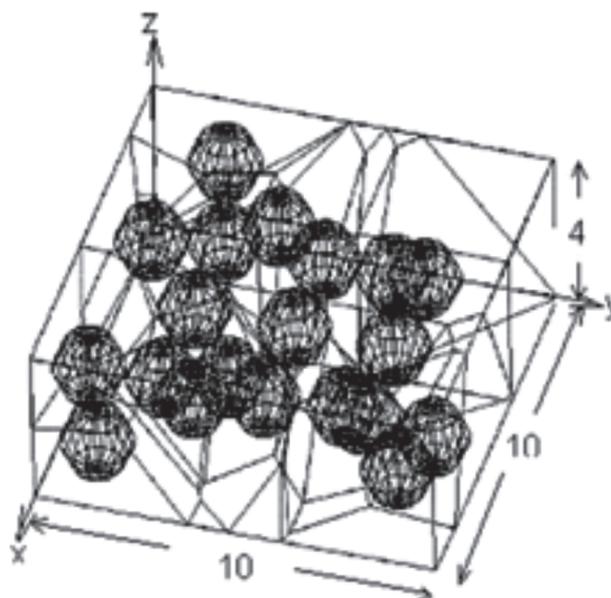
В связи с этим теоретические разработки в области применения метода конечных элементов в механике композитов преимущественно направлены на оптимизацию разбиения таким образом, чтобы модель материала описывалась меньшим количеством элементов. Основным инструментом в большинстве работ при этом является использование ячеек Вороного в качестве конечных элементов (в некоторых источниках они известны также как ячейки Дирихле). Исследования выполняются на всех стадиях моделирования, включая подход к разбиению на элементы, построение основной системы уравнений метода конечных элементов и выполнение расчета.

Так в работе [2] предложен подход к построению разбиения на ячейки Вороного трехмерной модели двухфазного композиционного материала, содержащего включения эллипсоидной формы. Авторами разработан оригинальный алгоритм разбиения, привязанный к форме базовой поверхности (в качестве таковой в рассматриваемой задаче выступает поверхность эллипсоида-включения). В результате достигнуто существенное сокращение количества элементов, задающих модель исследуемого материала (рисунок 1).

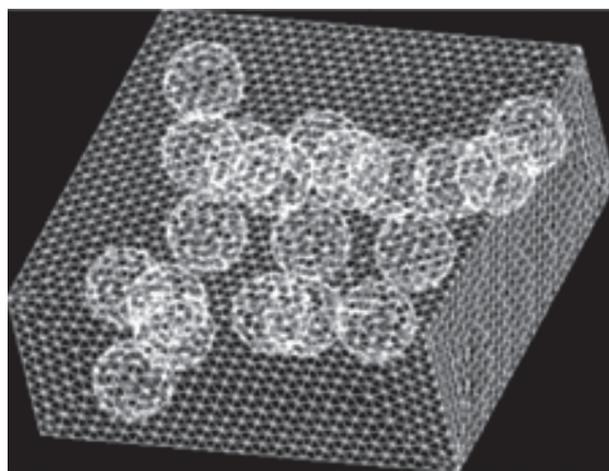
Для улучшения сходимости решения авторами [2] применяются особые функции напряжений, базирующиеся на функциях Ламе в эллипсоидальных координатах. Также рассмотрен ряд численных алгоритмов для решения построенной модели, проведена серия вычислительных экспериментов для материалов, характеризующихся различными размерами включений.

В работе [3] ученые из Клемсонского университета (США) предложили методику и соответствующий математический аппарат для расчета эффективных упругих свойств двухфазных композиционных материалов с применением метода конечных элементов. Данное исследование является одним из наиболее часто цитируемых в зарубежных работах последнего десятилетия по компьютерной механике композиционных материалов. Предложенная методика включает в себя следующие этапы:

- 1) разбиение области на ячейки Вороного таким образом, чтобы каждое включение полностью находилось в пределах одной ячейки;
- 2) разделение элементов (ячеек) по принципу — содержит включение или нет;
- 3) задание свойств материалов матрицы и включения;
- 4) расчет матриц жесткости элементов (авторами [3] предложены соотношения для определения матриц жесткости отдельно однородных элементов и элементов с включениями);
- 5) наложение связей, обеспечивающих единство перемещений включения и матрицы в рамках эле-



а



б

Рисунок 1 — Конечно-элементная модель материала с включениями эллипсоидной формы: а — построенная по методике, предложенной в [2]; б — построенная средствами универсального пакета для конечно-элементного анализа

мента (соответствующие соотношения также приведены в работе [3]);

б) задание граничных условий, составление и решение системы уравнений, получаемой из основного соотношения метода конечных элементов [1].

Согласно предложенной методике был выполнен анализ сплавов Ni/MgO и Ni<sub>3</sub>Al/TiC, определены их эффективные упругие свойства.

Исследование [4] направлено на обеспечение сходимости метода конечных элементов, основанного на разбиении на ячейки Вороного, при его применении к исследованию свойств неоднородных материалов (в частности, двухфазного композита). Авторами сформулированы критерии сходимости, базирующиеся на определении погрешности энергии деформирования и непрерывности перемещений на взаимных границах элементов. Также вы-

полнено усовершенствование математической формулировки метода конечных элементов, основанного на разбиении на ячейки Вороного, с целью улучшения сходимости метода по указанным критериям. Для проверки эффективности предложенной формулировки авторами [4] проведена серия экспериментов для композитов с различным распределением включений различной формы и размера.

Интерес представляют также теоретические разработки в области моделирования композиционных материалов, не связанные с разбиением на ячейки Вороного. Так в [5] в качестве способа решения проблем, связанных с моделированием областей у границ раздела фаз композитов, предложен «метод многофазных элементов». При реализации данного метода на построенную геометрическую модель композита накладывается сетка специальных конечных элементов. Построение разбиения осуществляется вне зависимости от расположения и границ фаз. Каждый элемент может быть виртуально разделен на подобласти, каждая из которых ассоциирована с гауссовой точкой элемента. Механические свойства подобласти назначаются в зависимости от того, к какой фазе геометрически принадлежит гауссова точка, которой он соответствует. Авторами [5] разработано математическое описание трехмерного варианта двухфазного элемента. Аналогичный подход был применен автором работы [6] для двумерного случая.

Метод конечных элементов является численным и может быть реализован в виде компьютерной программы, равно как и его формулировка, адаптированная к решению задач механики композиционных материалов. Но задача написания данной программы является нетривиальной. Ее решение требует глубоких математических знаний и навыков программирования. Также следует отметить, что специализированная адаптация метода конечных элементов может быть выполнена преимущественно к композитам с включениями простейшей формы (сферические, эллиптические и т. д.). Вышеуказанные обстоятельства создают определенные трудности для широкого распространения данного подхода в исследовательской практике.

**Расчет напряженно-деформированного состояния представительных объемов композитов с применением универсальных компьютерных пакетов.** Расчет свойств материала на базе компьютерного моделирования представительных объемов первоначально применялся при анализе композиционных материалов, армированных волокнами. В работе [6] с использованием компьютерного пакета ABAQUS выполнен расчет методом конечных элементов простейшей модели, представляющей собой волокно с круглым поперечным сечением, находящееся в матрице. В данной модели принят ряд допущений, значительно упрощающих расчет: строгая периодичность расположения армирующих волокон, отсутствие влияния остальных включений на напряженно-деформированное состояние рассмат-

риваемого представительного объема и др. Тем не менее, даже с учетом указанных допущений построенная модель стала достаточно эффективной при изучении общих закономерностей распределения напряжений в окрестности включения.

Данный подход получил развитие в ряде других работ. Исследования [7–9] посвящены расчетам двумерных моделей представительных объемов армированных композиционных материалов, схожих по принципу построения с рассмотренной в [6], но существенно дополненных. В [7] предложена расчетная схема для анализа и оптимизации свойств композита, учитывающая его температурные свойства. Расчет выполнен с использованием инструментов универсального пакета прикладных программ ANSYS, построенного на базе метода конечных элементов. В работе [8] рассмотрена модель полимерного композита, включающая в себя два армирующих волокна и слой матрицы, расположенный между ними. С применением пакета ABAQUS авторами рассчитаны поля остаточных напряжений, образующихся в матрице в результате термической обработки. Показано, что именно данные напряжения играют ключевую роль в механизме разрушения исследуемого композита. В работе [9] рассмотрен многослойный композиционный материал. Модель, построенная авторами работы в пакете ANSYS, включает в себя четыре четырехслойных волокна, причем каждый слой характеризуется особыми механическими свойствами. В результате выполненных исследований получены эффективные упругие характеристики исследуемого материала. Отмечено хорошее согласование результатов моделирования с экспериментальными данными.

В современной расчетной практике предпринимаются попытки моделирования представительных объемов материалов с более сложной микроструктурой. Так, в [10] выполнено комплексное исследование свойств высокоэнергетических композиционных материалов, структура которых характеризуется наличием включений с круглым поперечным сечением. Серия задач решалась в двумерной постановке средствами пакета ANSYS. Автором рассмотрен ряд моделей со строгим периодичным и произвольным (случайным) расположением включений различного радиуса, выполнен расчет упругих механических характеристик.

На территории СНГ также проводятся работы по компьютерному моделированию композитов. Так, специалистами Черниговского государственного университета выполнено исследование характеристик вязкоупругих композиционных материалов с различными схемами армирования [11]. Основой также стало конечно-элементное моделирование представительных объемов в программном комплексе ANSYS. Авторами были построены математические модели однонаправленных и пространственно-армированных вязкоупругих композиционных материалов с различными схемами

армирования с учетом влияния угла поворота и вида армирующих волокон, определены динамические характеристики исследуемых композитов.

Тем не менее, указанная методология применима лишь при моделировании и расчете свойств композиционных материалов с включениями, характеризующимися достаточно простой геометрией. При проведении анализа свойств композитов со сложной микроструктурой исследователями используются более совершенные инструменты моделирования.

В случае, если структура материала на микроуровне имеет ярко выраженное зернистое строение, то для построения его конечно-элементной модели зачастую используют разбиение на ячейки Вороного. Данный подход применен в работе [12] при расчете плотности энергии деформации слоя олова на медной подложке. Практическая значимость разработанной модели заключается в том, что она дала авторам инструмент для построения аналитической модели роста нитевидного кристалла Sn.

Разбиение на ячейки Вороного было использовано и в работе [13] при расчете упругих свойств сплавов на молибденовой основе. Компьютерное моделирование, выполненное автором, позволило определить модуль упругости и коэффициент Пуассона исследуемого материала на микроуровне. Расчет выполнен средствами универсального пакета для конечно-элементного анализа ANSYS.

Вместе с тем исследователями ведутся интенсивные работы по поиску методов построения моделей реальной микроструктуры материала.

Авторами работы [14] выполнено исследование композита на металлической матрице, упрочненного частицами SiC, характеризующимися неправильной формой, аппроксимировать которую простейшими геометрическими фигурами не представляется возможным:

- 1) путем применения специализированных алгоритмов на снимке микроструктуры выделены упрочняющие частицы, выполнена очистка изображения от помех;
- 2) на базе обработанного изображения построена двумерная конечно-элементная модель композита;
- 3) выполнен расчет, определены поля пластических деформаций, формируемых в результате придания объему относительной деформации, равной 10 %.

Недостатком данной работы является то, что двумерная постановка задачи в случае, когда включения имеют сложную геометрию, не позволяет в требуемой мере оценить поведение материала.

Оригинальный подход к решению задачи компьютерного моделирования реальной микроструктуры композита предложен в работах [15, 16]. Авторами разработан метод, позволяющий воссоздать трехмерную модель композита на базе изображений его сечений. Он включает в себя следующие этапы:

- подготовка образца (фольги);
- обозначение исследуемой области;
- полировка;
- создание изображения (фотографирование) и сегментация (выделение областей с частицами);
- «сборка» из сечений соответствующих частиц их трехмерных моделей;
- создание области матрицы вокруг моделей частиц.

Построенная таким образом геометрическая модель может быть разбита на конечные элементы средствами универсального пакета прикладных программ (ANSYS, ABAQUS, NASTRAN и др.) с последующим выполнением расчета (рисунок 2).

На сегодняшний день подход, базирующийся на моделировании и расчете представительных объемов композиционных материалов с применением универсальных пакетов прикладных программ, является наиболее широко распространенным в исследовательской практике. С его использованием осуществляется анализ практически всех композитов: от имеющих простейшую микроструктуру с упорядоченно расположенными включениями простейшей формы, до материалов, характеризующихся хаотическим расположением включений произвольных размеров и форм. Данный подход является достаточно наглядным и простым с точки зрения практической реализации. Вместе с тем следует отметить, что значительную часть времени при выполнении моделирования занимает построение модели. В связи с этим наметилась тенденция к совершенствованию расчетного инструментария механики композитов и переходу от применения универсальных программных продуктов к разработке специализированных, предназначенных для решения задач непосредственно моделирования поведения и расчета их характеристик композиционных материалов.

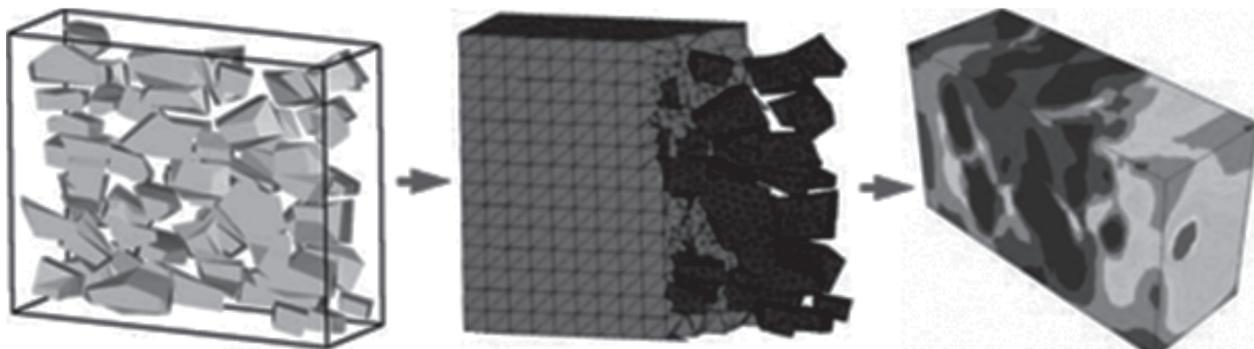
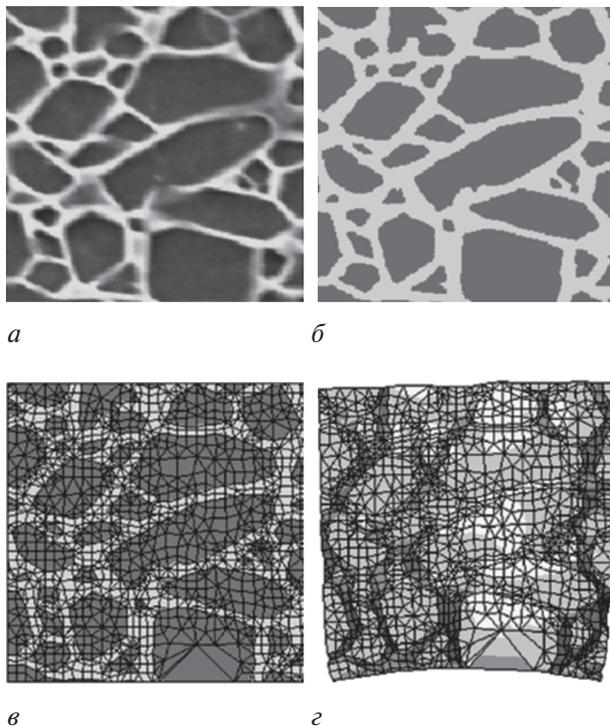


Рисунок 2 — Выполнение расчета трехмерной модели представительного объема композиционного материала [15, 16]

**Применение самостоятельных программных средств.** Одним из самых первых специализированных программных средств, предназначенных для расчета свойств композиционных материалов на микроуровне, является пакет OOF, разработанный Национальным институтом стандартов и технологии США (National Institute of Standards and Technology, USA). На сайте <http://www.ctcms.nist.gov> для свободного скачивания представлена последняя версия программы OOF2 version 2.1.7 [17].

Данный программный продукт [18] позволяет построить конечно-элементную модель для расчета на основе снимка микроструктуры (рисунок 3 а). Предварительно пользователь очищает изображение от помех таким образом, чтобы были видны четко выделенные структуры (см. рисунок 3 б), и задает механические свойства каждой из них (каждому пикселю с определенным оттенком серого на фотографии ставится в соответствие материал с определенными упругими характеристиками). Далее инструментами программного комплекса на изображение в автоматическом режиме накладывается сетка конечных элементов (см. рисунок 3 в), которая при необходимости может быть уточнена пользователем. После задания граничных условий и действующих нагрузок выполняется расчет построенной модели. В результате пользователем могут быть получены картины деформирования, распределения напряжений (см. рисунок 3 г), температур и др.



**Рисунок 3 — Порядок построения и расчета компьютерной модели микроструктуры средствами пакета OOF:**

а — снимок микроструктуры  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ; б — выделенные компоненты структуры; в — сетка конечных элементов; г — компонента деформаций  $\epsilon_{xx}$  при наложении условий Дирихле на нижнюю границу и задании термического расширения зерен [18]

На сегодняшний день программный комплекс OOF предоставляет полный спектр инструментов для выполнения расчета напряженно-деформированного состояния композиционных материалов на микроуровне, используя в качестве исходной геометрической модели изображения микроструктуры, полученные экспериментально или на базе статистической модели [18]. Несомненным его преимуществом является свободное распространение. В OOF также предусмотрена возможность создания пользователем собственных макросов и скриптов, расширяющих возможности программного продукта. Более того, создатели программы (NIST, USA) приветствуют данную активность, готовы к рассмотрению программных реализаций, направленных на расширение возможностей пакета, и включению их в последующие версии.

С применением пакета OOF был выполнен расчет напряженно-деформированного состояния и механических характеристик сплава на молибденовой основе [13], исследование деформирования двухфазного композита, состоящего из частиц карбида вольфрама и кобальта [19], моделирование алюминиевого композита, упрочненного углеродными нанотрубками, и расчет его теплопроводности [20].

Среди недостатков можно отметить то, что OOF предназначен для расчета задач механики композитов только в двумерной постановке, что не всегда может дать полную картину о поведении материала. Кроме того, программный комплекс может быть установлен только на операционные системы Linux и Macintosh. Версии, адаптированной под операционную систему Microsoft на данный момент не разработано, что создает определенные трудности для широкого использования данного программного продукта в исследовательской практике отечественных ученых.

Среди альтернативных вариантов программных продуктов можно выделить платформу Digimat-FE [21], которая предоставляет возможности для построения и расчета методом конечных элементов компьютерных моделей представительных объемов композиционных материалов с последующим определением характеристик напряженно-деформированного состояния. Могут быть созданы многофазные композитные микроструктуры, состоящие из сфер, пластин, эллипсоидов, цилиндров, призм и произвольных геометрических объемов, форма поверхности которых определяется пользователем в файле геометрии. Пакет предоставляет возможность расчета задач в упругой, упругопластической, термоупругой, вязкоупругой и гиперупругой постановках. В качестве решателя использованы возможности универсального пакета для конечно-элементного анализа ABAQUS.

Digimat-FE реализуется на коммерческой основе. Он сочетает в себе возможности программных комплексов для трехмерного моделирования и конечно-элементного анализа применительно к

задачам материаловедения. Вместе с тем на сегодняшний день в научной печати не представлено весомых исследований, выполненных с применением пакета Digimat-FE.

Также следует отметить, что существующий функционал Digimat-FE может быть воспроизведен и универсальными пакетами. В частности построение трехмерной модели представительного объема может быть выполнено средствами CAD-пакета (NX, SolidWorks и др.). Затем построенная модель может быть импортирована и рассчитана средствами пакета для конечно-элементного анализа (ANSYS, ABAQUS, NASTRAN и др.).

В целом можно констатировать, что подход, связанный с применением специализированных пакетов при решении задач механики композиционных материалов на сегодняшний день находится на начальном этапе развития. Рано говорить о том, что существует общепризнанный программный продукт, который позволит в пределах одного расчетного пространства выполнить моделирование и расчет любой постановки задачи. Несомненным преимуществом OOF является возможность анализа реальной микроструктуры. Вместе с тем данный программный комплекс разработан исключительно под Unix-операционные системы (Linux, Macintosh) и предназначен только для решения задач в двумерной постановке. В то же время наличие комплекта из пакета для трехмерного параметрического моделирования и программы для конечно-элементного анализа конструкций позволяет отказаться от использования программного комплекса Digimat-FE при выполнении моделирования и расчета свойств композита на микроуровне в трехмерной постановке. Тем не менее необходимость дальнейшего развития систем моделирования в области механики композиционных материалов не вызывает сомнения. Она подтверждается уже имеющимся опытом успешного применения конечно-элементного моделирования при создании и совершенствовании свойств композитов.

**Опыт применения конечно-элементного анализа при совершенствовании свойств композиционных материалов и объяснении процессов, происходящих на микроуровне.** Компьютерное и в частности конечно-элементное моделирование находит все большее применение при решении задач в области механики композиционных материалов. Значительная часть выполненных работ направлена на то, чтобы показать принципиальную возможность применения виртуальных технологий к исследованию свойств реальных материалов на микроуровне, обосновать эффективность данного подхода. Вместе с тем посредством конечно-элементного моделирования зарубежными учеными достигнуты определенные научно-практические результаты. Помимо уже упомянутых выше, в данном контексте необходимо отметить работы [22–26], в которых технологии конечно-элементного анали-

за успешно применены при описании свойств, процессов деформирования и разрушения композиционных материалов.

В работе [22] авторами с использованием инструментов системы конечно-элементного моделирования ABAQUS разработан и выполнен расчет ряда двумерных моделей полимерного композита, упрочненного наночастицами. В результате установлено, что модуль упругости исследуемого материала находится в прямой связи с соотношением длины и ширины сечений упрочняющих частиц. Также показано, что значительное влияние на механические свойства нанокомпозита оказывает форма частиц и степень их кластеризации. На основании полученных результатов авторами выполнена доработка модели Мори–Танаки, используемой для расчета эффективных упругих свойств композита. Построенные модели и полученные результаты могут в последующем стать инструментом для прогнозирования свойств композитов рассматриваемого класса.

В работе [23] внимание исследователей сосредоточено на температурных свойствах композиционных материалов. Объектом исследования являлся металлокомпозит на алюминиевой матрице, упрочненный частицами SiC. Предварительные экспериментальные исследования показали, что его коэффициент температурного расширения в значительной степени зависит от распределения и ориентации упрочняющих частиц. Вместе с тем существующие аналитические модели не позволяли установить данный факт. Для подтверждения и обоснования полученных результатов авторами выполнено конечно-элементное моделирование представительного объема материала. При построении геометрии за основу взята реальная микроструктура исследуемого металлокомпозита. В результате выполненной серии виртуальных экспериментов авторами [23] получен ряд графиков, связывающих параметры микроструктуры композита и его коэффициент температурного расширения. Показано, что ориентация частиц SiC изменяет внутренние напряжения в композите, что в свою очередь приводит к анизотропии температурных свойств, установленной ранее экспериментально.

С помощью конечно-элементного моделирования значительных успехов удалось добиться в исследовании и описании процессов разрушения композиционных материалов.

В совместной работе польских и белорусских ученых [24] выполнен конечно-элементный анализ напряженно-деформированного состояния поверхности азотированного титанового сплава Ti-6Al-2Mo-2Cr. Особый интерес для авторов исследования представляло поведение материала в области перехода между поверхностным модифицированным слоем и подложкой. В связи с этим рассмотренная модель включала в себя поверхностный слой чистой фазы покрытия, переход-

ный слой, образованный фазами покрытия и подложки, и слой подложки. Выполненное моделирование позволило установить, что именно переходный слой исследуемого азотированного сплава характеризуется наличием зон с повышенным уровнем растягивающих напряжений (рисунок 4), и, как следствие, является наиболее опасным с точки зрения прочности. Кроме того, полученные результаты в совокупности с анализом физики процессов, происходящих в титановых сплавах при азотировании по различным технологиям, позволили авторам объяснить природу зарождения трещин в исследуемом титановом сплаве при его азотировании в аммиачной среде и причину сохранения высокой циклической долговечности сплава, подвергнутого азотированию в атмосфере технического азота либо ионно-плазменному азотированию.

Авторами исследования [25] рассмотрен композит, упрочненный сферическими частицами, расположенными в произвольном порядке. В результате выполненного конечно-элементного моделирования показано, что при растяжении под действием соответствующего напряжения наблюдается образование пустот в области между частицами, расположенными вдоль оси деформирования. При дальнейшем деформировании происходит рост пустот и релаксация напряжений пластического течения. С данным моментом авторы связали максимум на диаграмме растяжения композита.

В работе [26] также выполнено исследование композиционного материала, упрочненного сферическими частицами. Вместе с тем основное внимание автора обращено на влияние объемной доли и распределения частиц на разрушение материала. На базе конечно-элементного моделирования установлено, что по мере упорядочения расположения частиц повышается напряжение пластического течения материала. В работе также даны рекомендации по улучшению характеристик устойчивости к разрушению для отдельных металлокомпозитов.

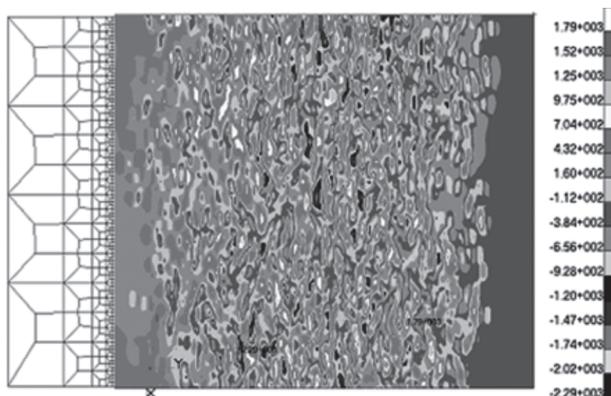


Рисунок 4 — Результаты моделирования и расчета напряженно-деформированного состояния поверхностного слоя азотированного титанового сплава Ti-6Al-2Mo-2Cr [24]

**Заключение.** Современная механика композиционных материалов располагает широким набором инструментов для компьютерного моделирования и расчета свойств композитов, включающим теоретические разработки (в области адаптации формулировок и соотношений метода конечных элементов, позволяющей учесть особенности микроструктуры), практику непосредственного расчета представительных объемов композитов с использованием универсальных компьютерных пакетов и специализированных программных средств. Выбор метода исследования определяется микроструктурой композита а также программно-аппаратными средствами, имеющимися в распоряжении исследователя.

Адаптация метода конечных элементов может быть выполнена преимущественно к композитам с включениями простейшей формы (сферические, эллиптические и т. д.). Вместе с тем она сопровождается большим объемом выкладок, требует наличия глубоких математических знаний и навыков программирования. В этой связи более перспективными для отечественной практики исследования композиционных материалов являются подходы, базирующиеся на применении универсальных и специализированных программ конечно-элементного моделирования.

Если рассматриваемый композит характеризуется сложной микроструктурой, но исследователь располагает аппаратурой для получения ее изображения, то целесообразным может быть использование специализированных программных средств, в частности пакета OOF, разработанного Национальным институтом стандартов и технологии США (National Institute of Standards and Technology, USA). Эффективность данного программного комплекса была неоднократно показана зарубежными исследователями при выполнении моделирования сплавов на молибденовой основе, двухфазных композитов, состоящих из частиц карбида вольфрама и кобальта, алюминиевого композита, упрочненного углеродными нанотрубками и других материалов. Основные ограничения для широкого использования пакета OOF в практике отечественных ученых связаны с тем, что он реализован для операционных систем Linux и Macintosh, мало распространенных в СНГ.

Вместе с тем наиболее простым и наглядным при анализе свойств и поведения композиционных материалов является подход, базирующийся на конечно-элементном анализе представительных объемов с использованием универсальных программных средств (ANSYS, ABAQUS, NASTRAN и др.). Он позволяет выполнить расчет и анализ как реальной микроструктуры, так и ее модели, в которой частицы представлены объемами простейшей формы. С применением преимущественного данного подхода были получены ценные практические результаты в части описания свойств, процессов

деформирования и разрушения композитов. Из рассмотренных в работе на сегодняшний день именно данный подход имеет наибольшие перспективы для применения и развития в отечественных научно-исследовательских институтах и центрах, связанных с разработкой, созданием и исследованием композиционных материалов.

### Список литературы

1. Зенкевич, О. Метод конечных элементов в технике / О. Зенкевич — М.: Изд-во «Мир», 1975. — 542 с.
2. Ghosh, S. Three dimensional Voronoi cell finite element model for microstructures with ellipsoidal heterogeneities / S. Ghosh, S. Moorthy // Computational Mechanics — 2004. — Vol. 34. — Pp. 510–531.
3. Grujicic, M. Determination of effective elastic properties of functionally graded materials using Voronoi cell finite element method / M. Grujicic, Y. Zhang // Material science and engineering — 1998. — № A251. — Pp. 64–74.
4. Moorthy, S. Adaptivity and convergence in the Voronoi cell finite element model for analyzing heterogeneous materials / S. Moorthy, S. Ghosh // Computer methods in applied mechanics and engineering — 2000. — № 185. — Pp. 37–74.
5. 3D-finite-element-modeling of microstructures with the method of multiphase elements / N. Lippmann [et al.] // Computational materials science. — 1997. — № 9. — Pp. 28–35.
6. Bohm, H.J. Some simple models for micromechanical investigations of fiber arrangement effects in MMCs / H.J. Bohm, F.G. Rammerstorfer, E. Weisenbek // Computational Materials Science. — 1993. — Vol. 1, issue 3. — Pp. 177–194.
7. Boguszewski, T. Design rules for optimizing microstructures of composite for thermal management / T. Boguszewski, L. Ciupinski, K. Kurzydowski // The International Conference «Advanced Processing for Novel Functional Materials — APNFM 2008» [Electronic recourse]. — 2012. — Mode of access: www.sfet.pl/doc/design-rules-dresden.pdf. — Date of access: 26.06.2012.
8. Maligno, A.R. Finite element investigations on the microstructure of fibre-reinforced composites / A.R. Maligno, N.A. Warrior, A.C. Long // eXPRESS Polymer Letters. — 2008. — Vol. 2, № 9. — Pp. 665–676.
9. Xu, Y.J. Microstructure modeling and prediction of effective elastic properties of 3D multiphase and multilayer braided composite / Y.J. Xu, W.H. Zhang, M. Domaszewski // Materials Science and Technology. — 2011. — Vol. 27, № 7. — Pp. 1213–1221.
10. Banerjee, B. Micromechanics-based prediction of thermoelastic properties of high energy materials : res. prop. ... Doctor of Philosophy. — USA: Utah, 2002. — 183 p.
11. Яковенко, О.А. Применение ANSYS для анализа динамических характеристик композиционных материалов / О.А. Яковенко, И.В. Завальня, Ю.Н. Наливайко // ANSYSAdvantage. Русская редакция. — 2011. — № 15. — С. 63–64.
12. Zhao, J. Microstructure-based Stress Modeling of Tin Whisker Growth / Jue-Hua Zhao, Peng Su, Min Ding, Sheila Chopin, Paul S. Ho // IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology — 2006. — Vol. 29, № 4. — Pp. 265–273.
13. Biragoni, Pr. Modeling the influence of microstructure on elastic properties and tensile damage behavior of Mo-base silicide alloys: dissert. ... Dr.-Ing. — Germany: Magdeburg, 2007. — 109 p.
14. Zhang, P. Effect of particle characteristics on deformation of particle reinforced metal matrix composites / Peng Zhang, Fuguo Li // Transactions of Nonferrous Metals Society of China. — 2010. — № 20. — Pp. 655–661.
15. Chawla, N. Three-dimensional (3D) microstructure visualization and finite element modeling of the mechanical behavior of heterogeneous materials / N. Chawla, V.V. Ganesh // Microscopy and Microanalysis. — 2005. — № 11. — Pp. 1642–1643.
16. Chawla, N. Microstructure-based finite element modeling of particle reinforced metal matrix composites / N. Chawla, K.K. Chawla // Journal of Materials Science. — 2006. — № 41. — Pp. 913–925.
17. OOF: Finite Element Analysis of Macrostructures // National Institute of Standards and Technology [Electronic recourse]. — 2012. — Mode of access: <http://www.ctcms.nist.gov/oof/oof2/>. — Date of access: 21.06.2012.
18. Reid, A. Modeling microstructures with OOF2 / Andrew C.E. Reid, Rhonald C. Lua // International Journal of Materials and Product Technology. — 2009. — Vol. 35, № 3/4. — Pp. 361–373.
19. Kim, Ch. Modeling the relationship between microstructural features and the strength of WC-Co composites / Ch. Kim, T. Massa, G. Rohrer // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. — 2006. — № 24. — Pp. 89–100.
20. Bakshi, S. Thermal conductivity of carbon nanotube reinforced aluminium composites: A multi-scale study using object orientated finite element method / S. Bakshi, R. Patel, A. Agarwal // Computational Material Science. — 2010. — № 50. — Pp. 419–428.
21. Digimat-FE // X-tream engineering [Electronic recourse]. — 2012. — Mode of access: <http://www.e-xstream.com/en/digimat-software/digimat-fe.html>. — Date of access: 11.05.2012.
22. Modeling of nano-reinforced polymer composites: microstructure effect on Young's modulus / R. Peng [et al.] // Computational Material Science. — 2012. — № 60. — Pp. 19–31.
23. Chawla, N. Thermal expansion anisotropy in extruded SiC particle reinforced 2080 aluminium alloy matrix composites / N. Chawla, X. Deng, D. Schnell // Material Science and Engineering. — 2006. — № A426. — Pp. 314–322.
24. Патеюк, А.П. Износостойкость и сопротивление усталости азотированного титанового сплава Ti-6Al-2Mo-2Cr / А.П. Патеюк, В.А. Кукареко // Механика машин, механизмов и материалов. — 2008. — № 4(5). — С. 85–88.
25. Llorca, J. Three-dimensional multiparticle cell simulations of deformation and damage in sphere-reinforced composites / J. Llorca, J. Segurado // Material Science and Engineering. — 2004. — № A365. — Pp. 267–274.
26. Mishnaevsky, L. Microstructural effects on damage in composites — computational analysis / L. Mishnaevsky // Journal of Theoretical and Applied Mechanics. — 2006. — № 44. — Pp. 533–552.

Kniazeva E.N., Kukareko V.A., Alexandrov V.Y., Timoshenko N.P.

### Application of the finite element method to the investigation of composite materials. Approaches, methods, computer programmes

Main approaches to application of finite element method to the investigation of composite materials are reviewed and analyzed, including theoretical suggestions, direct calculation of representative volumes of composites by means of universal computer packages, using of specialized programs. Advantages, disadvantages, limitations and perspectives of using of different approaches in the investigation of mechanical properties of composite materials are shown. Experience of application of finite element modeling to the improvement of properties of composites so as to the explanation of micro-level processes is also reviewed.

**Keywords:** composite material, modeling, finite element method, microstructure, Voronov cells, meaningful volume

Поступила в редакцию 04.06.2013.