

На правах рукописи

СЕРГЕЕВА Елена Сергеевна

**РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ
ТРЕХУРОВНЕВОГО МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ЭФФЕКТИВНЫХ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва — 2020

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель:

доктор технических наук, профессор
Зарубин Владимир Степанович

Официальные оппоненты:

Лисовенко Дмитрий Сергеевич,
доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией механики технологических процессов Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН (ИПМех РАН)

Головин Николай Николаевич,
кандидат технических наук, старший научный сотрудник, начальник отдела АО «Корпорация «МИТ»

Ведущая организация:

Акционерное общество «Центральный научно-исследовательский институт специального машиностроения» (АО «ЦНИИСМ»)

Защита диссертации состоится «__» _____ 2020 года в __ час. __ мин. на заседании диссертационного совета Д 212.141.15 при Московском государственном техническом университете им. Н.Э. Баумана по адресу: 105005, г. Москва, 2-я Бауманская ул., д.5, стр. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана и на сайте www.bmstu.ru.

Автореферат разослан «__» _____ 2020 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат технических наук, доцент



Аттетков
Александр
Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. В различных областях техники широкое распространение получили композиционные материалы (композиты). Для таких отраслей промышленности, как аэрокосмическая и энергетическая, характерно, что элементы конструкций из композитов в процессе эксплуатации подвержены одновременному высокоинтенсивному воздействию полей различной природы. Следовательно, на этапе проектирования таких конструкций необходимо располагать достоверными оценками термомеханических характеристик используемых материалов.

Экспериментальные методы исследования являются наиболее надежными, однако их использование сопряжено зачастую со значительными временными, ресурсными и финансовыми затратами. Поэтому предпочтительными методами оценки свойств материалов являются методы математического моделирования. Первыми получили развитие аналитические подходы. Основные принципы механики композиционных материалов сформулированы в трудах В. Фойгта и А. Рейсса, описавших способы определения характеристик композита путем осреднения тензоров коэффициентов упругости и податливости. В дальнейшем были разработаны подходы, позволившие уточнить оценки Фойгта-Рейсса путем введения в рассмотрение неоднородности полей напряжений и деформации (З. Хашин, С. Штрикман и др.), учета различных типов взаимодействия между частицами неоднородности (И.М. Лифшиц, Л.Н. Розенцвейг, А.Г. Фокин, Т.Д. Шермергор, В.А. Ломакин, Л.П. Хорошун, Д.С. Лисовенко и др.), учета геометрических параметров включений (Дж. Эшелби, Ю.И. Цвелодуб и др.), учета схемы армирования композита (Р. Хилл, З. Хашин, Б. Розен, А.М. Скудра, Ф.Я. Булавс, В.П. Тамуж, Г.А. Тетерс, А.К. Малмейстер, Н.А. Алфутов, Н.Н. Головин, Б.С. Сарбаев и др.) и учета свойства периодичности среды (Р. Кристенсен, Н.С. Бахвалов, Г.П. Панасенко, Б.Е. Победря, Ю.И. Димитриенко и др.). Основными особенностями аналитических методов являются относительная простота реализации и зачастую введение большого количества допущений и упрощений, что может влиять на точность полученных результатов.

На сегодняшний день активное развитие и применение получили численные методы определения термоупругих характеристик композитов, среди которых стоит выделить методы, основанные на методе конечных элементов (МКЭ), в том числе многосеточные методы. Способы осреднения с использованием МКЭ заключаются в тех или иных преобразованиях с матрицами жесткости и теплопроводности. Изучению термомеханических свойств композитов с использованием таких

методов посвящено подавляющее большинство работ современных авторов (Ю.И. Димитриенко, А.С. Курбатов и А.Л. Медведский, В.В. Шайдуров, С.П. Копысов, Ю.А. Сагдеева и др.).

Таким образом, существует достаточно большое количество работ, посвященных разработке методов исследования термомеханических характеристик, применимых к композитам. Однако к настоящему времени нет формализованного подхода к построению трехуровневых математических моделей, под которыми понимают модели, связывающие термомеханические характеристики компонентов композита (1-й уровень), материала в целом (2-й уровень) и объекта из этого материала (3-й уровень). Следовательно, разработка методов трехуровневого моделирования термомеханических характеристик структурно-чувствительных материалов является актуальной задачей.

Цель и задачи исследования. Целью данной работы является разработка методов построения трехуровневых математических моделей термоупругости и теплопроводности для композита, армированного наноструктурными элементами, связывающих напряженно-деформированные состояния на 1-м, 2-м и 3-м уровнях, на основе принципов механики сплошной среды, а также создание программного комплекса на их основе, позволяющего проводить термомеханические расчеты элементов конструкции.

Для достижения поставленной цели потребовалось решение **следующих основных задач.**

1. Сравнительный анализ существующих математических моделей термоупругости и теплопроводности для неоднородного твердого тела.
2. Разработка и построение математических моделей термоупругости и теплопроводности для армирующих включений на 1-м уровне.
3. Реализация и анализ применимости математических моделей термоупругости и теплопроводности нанокompозита на 2-м уровне.
4. Построение численных алгоритмов, основанных на принципах многосеточных методов, обеспечивающих наиболее полную связь напряженно-деформированных состояний композита (2-й уровень) и объекта из него (3-й уровень) на примере задачи упругости.
5. Разработка и верификация программного комплекса для ЭВМ, предназначенного для моделирования термомеханических свойств элементов конструкции из нанокompозита.

Методы исследования. При решении задач, возникших в ходе выполнения диссертационной работы, были использованы методы вариационного исчисления и тензорной алгебры, метод конечных элементов и многосеточные методы.

Достоверность и обоснованность полученных результатов обеспечена строгостью используемого математического аппарата механики сплошной среды и подтверждена сравнением результатов с известными литературными данными.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые научные результаты.

1. Разработан подход к построению трехуровневых математических моделей термоупругости и теплопроводности для твердого тела с наноструктурой, связывающих напряженно-деформированные состояния на 1-м, 2-м и 3-м уровнях.
2. С использованием методов механики сплошной среды построена математическая модель, связывающая упругие характеристики однослойной углеродной нанотрубки (ОУНТ) с соответствующими свойствами графена, взятого за ее основу.
3. Разработан численный алгоритм, обеспечивающий связь напряженно-деформированных состояний моделей 2-го и 3-го уровней.
4. Для композита с периодической структурой получены соотношения, описывающие конечный элемент, соответствующий ячейке периодичности такого материала.
5. Создан конечно-элементный программный комплекс «ThermoMech-2D» с модульной структурой для трехуровневого моделирования термомеханических характеристик композитов.

Теоретическая и практическая ценность диссертационной работы связана с ее научной и прикладной направленностью и состоит в том, что разработанные методы трехуровневого математического моделирования термомеханических характеристик композитов, армированных наноструктурными элементами, являются основой при прогнозировании поведения новых перспективных конструкционных и функциональных материалов.

Разработан и зарегистрирован программный комплекс «ThermoMech-2D—численный расчет эффективных термомеханических характеристик структурно-чувствительных композиционных материалов» (свидетельство о государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ № 2019614994 от 16.04.2019 г.).

Положения, выносимые на защиту

1. Подход к построению трехуровневых математических моделей термоупругости и теплопроводности для твердого тела с наноструктурой, связывающих напряженно-деформированные состояния на 1-м, 2-м и 3-м уровнях.
2. Математическая модель для расчета упругих характеристик

ОУНТ на основании данных об упругих свойствах графена и конфигурации нанотрубки, построенная с использованием методов механики сплошной среды.

3. Численный алгоритм, обеспечивающий взаимосвязь напряженно-деформированных состояний композита и объекта из него.

4. Конечно-элементный программный комплекс «ThermoMech2D» с модульной структурой для трехуровневого моделирования термомеханических характеристик композитов.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы апробированы на XXI Школе-семинаре молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках» (г. Санкт-Петербург, 2017), Международной конференции «Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений» (СПММОИиПВ-2017) (пос. Дивноморское, 2017), Международной конференции V International Conference of Topical Problems of Continuum Mechanics (г. Цахкадзор, Республика Армения, 2017), Международной конференции «Fundamental and applied problems of mechanics FAPM-2017» (г. Москва, 2017), Международной конференции «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (г. Москва, 2017), Седьмой Российской Национальной конференции по теплообмену РНКРТ-7 (г. Москва, 2018), Международной конференции «Advance in composite science and technologies» (г. Москва, 2018), 16 International Conference Of Numerical Analysis And Applied Mathematics (о. Родос, 2018), Международной научно-технической конференции «Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (г. Воронеж, 2018), Международной научно-технической конференции «Пром-Инжиниринг» (г. Москва, 2018), Международной инновационной конференции молодых учёных и студентов по современным проблемам машиноведения «МИКМУС-2018» (г. Москва, 2018), 17 International Conference Of Numerical Analysis And Applied Mathematics (о. Родос, 2019).

Диссертация является составной частью фундаментальных исследований, проводимых в рамках гранта РФФИ 18-38-20108 мол_а_вед «Разработка математических моделей функционирования структурно-чувствительных материалов на основе численных решений и асимптотических представлений определяющих уравнений», гранта РФФИ 18-38-00618 мол_а «Разработка математических моделей и численных методов исследования термомеханических процессов в структурно-чувствительных материалах», гранта Президента Российской Федерации по государственной поддержке молодых ученых-кандидатов наук,

проект МК-6573.2015.8 «Разработка математических моделей и численных методов исследования термомеханических процессов в элементах конструкций из структурно-чувствительных материалов», гранта Президента Российской Федерации по государственной поддержке молодых ученых-кандидатов наук, проект МК-1069.2018.8 «Разработка математических моделей новых структурно-чувствительных материалов с учетом их производства», государственного задания Минобрнауки РФ, проект 9.7784.2017/БЧ «Разработка методов оценки термомеханических и электрофизических характеристик структурно-чувствительных материалов».

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 23 научных работах, в том числе в 8 статьях в изданиях, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science.

Личный вклад соискателя. Все исследования, изложенные в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию включен лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю, заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, результатов, и списка литературы. Работа изложена на 129 страницах, содержит 45 иллюстраций и 6 таблиц. Список литературы включает 191 наименование.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении перечислены и кратко рассмотрены существующие в современной литературе работы, посвященные методам моделирования термомеханических свойств композитов как структурно-чувствительных материалов, обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи исследования, основные положения, выносимые на защиту, приведены данные о структуре и объеме диссертационной работы.

В первой главе проведен аналитический литературный обзор по существующим подходам и методам моделирования термоупругих характеристик, которые могут быть применены к композитам. Рассмотрены методы моделирования механики сплошной среды, перечислены этапы их развития и проведен анализ их применимости на случай нанокompозита.

Вторая глава посвящена построению математических моделей первого уровня — моделей, описывающих термомеханические характеристики компонентов нанокompозита, под которыми на данном уровне понимают ОУНТ и матрицу, модифицированную шаровыми нанокластерами из хаотично ориентированных ОУНТ. Этот уровень моделирования рассмотрен отдельно от общей численной процедуры в силу того, что при

спуске с более высокого уровня модели на этот уровень возникают существенные затруднения с построением конечноэлементной сетки.

С использованием методов механики сплошной среды в предположении трансверсальной изотропии упругих свойств нанотрубки разработана математическая модель, связывающая коэффициенты податливости ОУНТ с упругими характеристиками графена, взятого за ее основу, и геометрическими параметрами нанотрубки. При разработке этой модели ОУНТ была представлена одновременно в виде прямолинейного круглого стержня и круговой цилиндрической оболочки (Рис. 1).

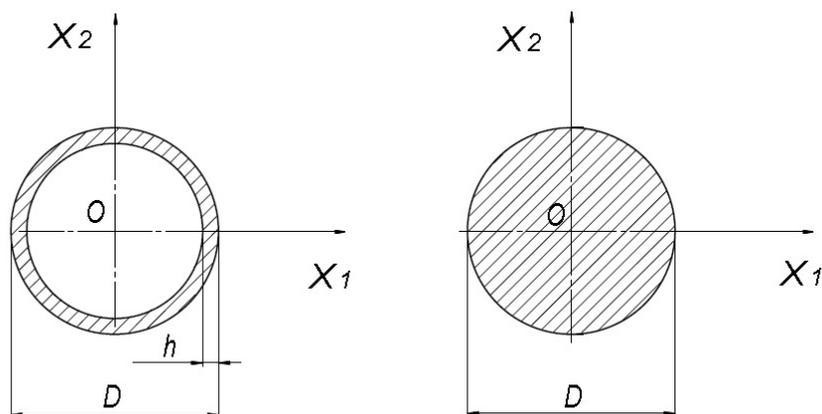


Рис. 1. Схематическое представление замены ОУНТ круговой цилиндрической оболочкой и прямолинейным круглым стержнем

Для разработки математической модели стержень и оболочка были нагружены: силой P , растягивающей вдоль оси ОУНТ, моментом M_3 вокруг оси нанотрубки, равномерно распределенным по ее боковой поверхности давлением p и линейным перемещением u_1 точки поверхности. Рассмотрение этих нагружений позволило записать выражения для ненулевых элементов матрицы S_{pq}^{nt} шестого порядка, поставленной в соответствие тензору коэффициентов податливости \mathbf{S}^{nt} ОУНТ:

$$S_{11}^{nt} = S_{22}^{nt} \frac{1 - \eta + \eta^2/2}{2(1 - \eta)\eta E^g}, \quad S_{12}^{nt} = \frac{\eta/2 - 1}{2(1 - \eta)E^g}, \quad S_{13}^{nt} = S_{23}^{nt} = \frac{-\nu^g/4}{E^g(1 - \eta)\eta},$$

$$S_{33}^{nt} = \frac{1/4}{E^g(1 - \eta)\eta}, \quad S_{44}^{nt} = S_{55}^{nt} = \frac{1/4}{(1 - \eta)^2 \eta G^g}, \quad S_{66}^{nt} = 2(S_{11}^{nt} - S_{12}^{nt}), \quad \eta = h/D,$$

где h — толщина однослойного графена, принятая равной 0,154 нм; $D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} \sqrt{m^2 + n^2 + mn}$ — диаметр ОУНТ; $d_0 = 0,142$ нм — расстояние между соседними атомами углерода в графеновой плоскости; (m, n) — индексы хиральности нанотрубки; E^g, ν^g, G^g — модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль сдвига графена. Матрица S_{pq}^{nt} является обратной матрице коэффициентов упругости C_{pq}^{nt} ОУНТ, которая соответ-

ствуется тензору \mathbf{C}^{nt} . С использованием метода самосогласования установлено, что при отношении $\bar{b} = \frac{b_1}{b_3} = 0,01$ характерных размеров ОУНТ в направлении оси вращения b_3 и перпендикулярном ему b_1 с достаточной точностью можно считать ОУНТ бесконечно длинной.

Согласно литературным данным, ОУНТ принята изотропной относительно температурного коэффициента линейного расширения (ТКЛР) и значение этого параметра выбрано равным значению ТКЛР графена $\alpha^{nt} = \alpha^g = 0,7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Эквивалентные коэффициенты теплопроводности ОУНТ определены с использованием математической модели переноса тепловой энергии теплопроводностью в нанотрубке:

$$\lambda_1^{nt} = \frac{\lambda^g h}{R}, \quad \lambda_3^{nt} = \frac{2Rh\lambda^g}{\tilde{R}^2}, \quad \tilde{R} = (R + h/2), \quad R = D/2.$$

Здесь $\lambda_3^{nt}, \lambda_1^{nt}$ — эквивалентные коэффициенты теплопроводности в направлении оси ОУНТ и в направлении, перпендикулярном этой оси.

С использованием подхода, основанного на методе самосогласования, определены упругие свойства нанокластера из хаотично ориентированных ОУНТ:

$$\begin{aligned} u_1^c &= 0, & u_2^c &= 0, \\ u_1^c &= \mathbf{u}^c \cdot \dots \cdot \mathbf{V}, & u_2^c &= \mathbf{u}^c \cdot \dots \cdot \mathbf{D}, \\ \mathbf{u}^c &= (\mathbf{C}^{nt} - \mathbf{C}^c (\mathbf{I} - \mathbf{N}^{nt}))^{-1} \cdot \dots \cdot (\mathbf{C}^c - \mathbf{C}^{nt}), \end{aligned}$$

где $\mathbf{C}^c = 3K^c \mathbf{V} + 2G^c \mathbf{D}$, \mathbf{C}^{nt} — тензоры четвертого ранга коэффициентов упругости нанокластера и ОУНТ; \mathbf{V} и \mathbf{D} — изотропные тензоры четвертого ранга, являющиеся соответственно объемной и девиаторной составляющими единичного тензора четвертого ранга \mathbf{I} ; K^c , G^c — объемный модуль упругости и модуль сдвига нанокластера; \mathbf{N}^{nt} — обратный тензор Эшелби четвертого ранга; каждая из точек между сомножителями в произведении тензоров обозначает операцию свертывания по индексу, одинаковому в обоих сомножителях.

После определения упругих констант нанокластера его ТКЛР определен из

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^c \cdot \dots \cdot \mathbf{I}_2 &= 0, \\ \mathbf{v}^c &= (\mathbf{C}^{nt} - \mathbf{C}^c (\mathbf{I} - \mathbf{N}^{nt}))^{-1} \cdot \dots \cdot (\mathbf{C}^c - \mathbf{C}^{nt}) \cdot \dots \cdot (\boldsymbol{\alpha}^{nt} - \boldsymbol{\alpha}^c), \end{aligned}$$

где \mathbf{I}_2 — единичный тензор второго ранга, $\boldsymbol{\alpha}^{nt}, \boldsymbol{\alpha}^c$ — изотропные тензоры второго ранга коэффициентов температурной деформации ОУНТ и нанокластера.

Эффективный коэффициент теплопроводности λ^c нанокластера в силу хаотичной ориентации осей вращения ОУНТ определен по соотношению

$$\lambda^c = \frac{\lambda_3^{nt} + 2\lambda_1^{nt}}{3}.$$

Также определены эффективные значения объемного модуля упругости K^{mm} , модуля сдвига G^{mm} и ТКЛР α^{mm} модифицированной матрицы с использованием выше упомянутого метода самосогласования и численным моделированием в конечно-элементном программном комплексе ANSYS. С применением двойственных вариационных формулировок задач термоупругости и теплопроводности в неоднородном твердом теле определены двусторонние оценки для термомеханических характеристик такой матрицы при различных объемных концентрациях C_V армирующих включений.

Получены значения термомеханических свойств ОУНТ и модифицированной нанокластерами матрицы, которые далее являются входной информацией для моделей второго и третьего уровней трехуровневых моделей, описывающих термоупругое и тепловое поведение нанокompозита и объекта из него.

В третьей главе исследована применимость различных аналитических математических моделей для определения характеристик неоднородного материала на примере двумерной задачи упругости, соответствующей поперечному сечению однонаправленного волокнистого композита с периодической структурой (Рис. 2).

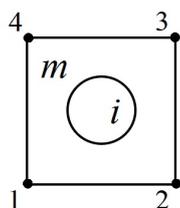


Рис. 2. Модель ячейки периодичности композита

Проведен сравнительный анализ полученных результатов с конечно-элементным расчетом, реализованным в программном комплексе ANSYS. Сделан вывод о затруднительности использования аналитических подходов для построения моделей 2-го уровня и необходимости реализации численного алгоритма решения такой задачи. В силу наличия периодичности в рассматриваемом материале сделан вывод о необходимости разработки варианта КЭ, отражающего необходимые свойства ячейки периодичности материала.

С использованием МКЭ реализован алгоритм построения матрицы жесткости $[KS]$ ячейки периодичности композита, соответствующей

математической модели 2-го уровня: в выбранной области сгенерирована конечно-элементная сетка, состоящая из классических трех- и четырехузловых элементов; для каждого из типов элементов построены функции перемещений и функции формы; в зависимости от типа напряженно-деформированного состояния составлена матрица упругости, описывающая свойства материалов; для каждого из типов элементов составлены матрицы жесткости; составлена матрица жесткости системы из трех- и четырехузловых конечных элементов.

На основании построенной матрицы жесткости $[KS]$ сформирована матрица жесткости $[K^{ie}]$ 4-х узлового конечного элемента, соответствующего ячейке периодичности композита (Рис. 2). Для этого к системе классических конечных элементов, соответствующей 2-му уровню моделирования, поочередно приложены 8 видов тестовых кинематических граничных условий $U_0—U_7$ (Рис. 3), обеспечивающих линейно-независимые напряженно-деформированные состояния системы.

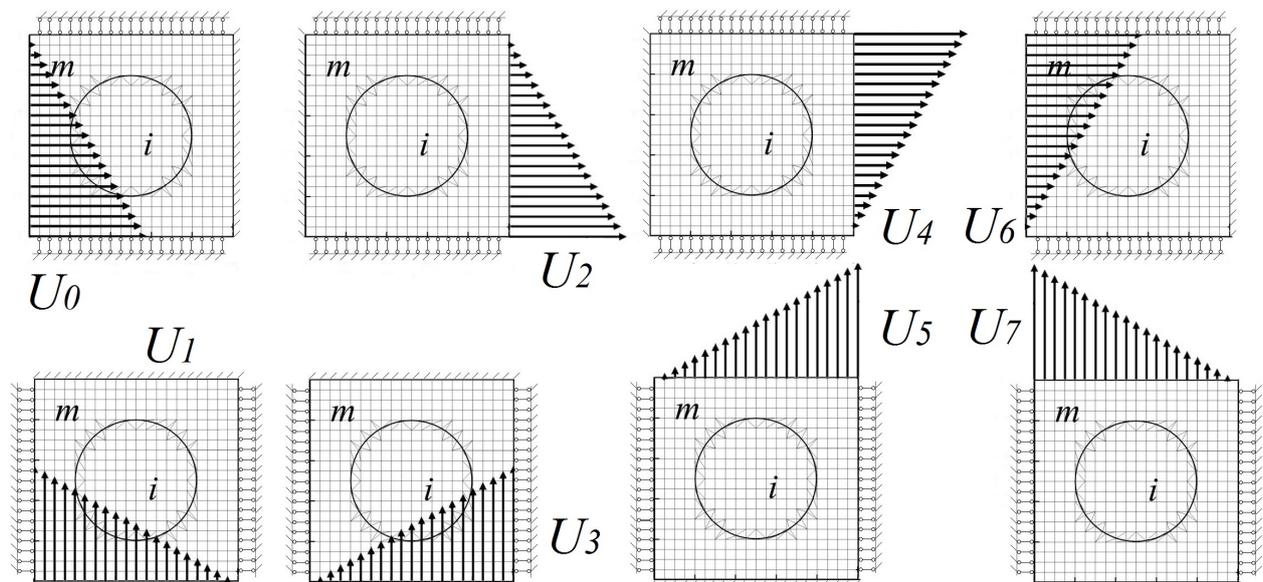


Рис. 3. Тестовые граничные условия, прикладываемые к конечно-элементной модели 2-го уровня

Для каждого типа граничных условий стандартным МКЭ решена система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$[KS] \{\delta\}_i = \{0\}$$

относительно неизвестных перемещений узлов. Здесь $[KS]$ — матрица жесткости конечно-элементной модели 2-го уровня, $\{\delta\}_i$ — вектор перемещений узлов конечно-элементной модели 2-го уровня, $i = 0, \dots, 7$ — тип тестовых граничных условий.

С учетом полностью сформированных векторов $\{\delta_i\}$ с использованием МКЭ для каждого типа нагружения определены компоненты век-

торов узловых сил $\{f\}_i$ такой системы. Затем силы $\{f\}_i$, находящиеся в граничных узлах, были просуммированы в силы $\{F\}_i$ в угловых узлах, соответствующих узлам неоднородного конечного элемента. Суммирование сил проведено, исходя из их близости к узлу неоднородного конечного элемента и расположения относительно середины его грани. Принцип суммирования в угловые узлы проиллюстрирован на Рис. 4.

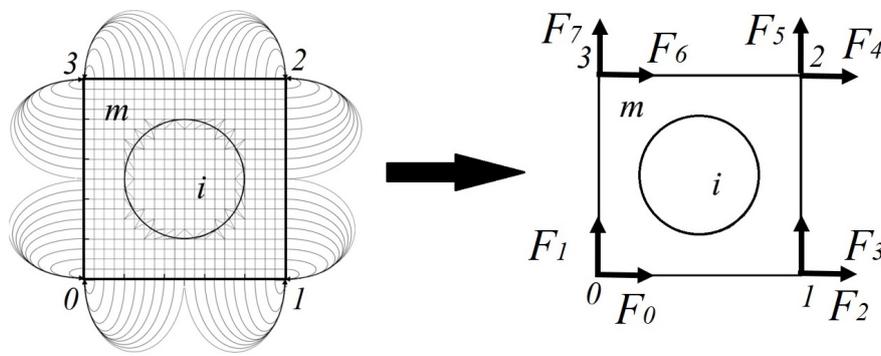


Рис. 4. Определение узловых сил 4-х узлового конечного элемента

Далее к конечному элементу, описывающему ячейку периодичности композита, поочередно приложены тестовые кинематические граничные условия $U_0^{fe} - U_7^{fe}$, соответствующие 8 видам тестовых кинематических граничных условий $U_0 - U_7$ (Рис. 3) для модели 2-го уровня. Из рассмотрения таких тестовых нагружений конечного элемента, соответствующего ячейке периодичности композита, и соотношения

$$[K^{fe}] \{\delta\}_i = \{F\}_i$$

составлена матрицы жесткости $[K^{fe}]$ такого элемента.

Следующим шагом, обеспечивающим связь моделей 2-го и третьего уровней, было определение напряженно-деформированного состояния конечно-элементной модели 2-го уровня, возникающее при приложении граничных условий к объекту из такого периодического композита — модели 3-го уровня. Для этого к объекту из композита с периодической структурой приложены кинематические граничные условия $\{\Delta^{fe}\}$ (Рис. 5).

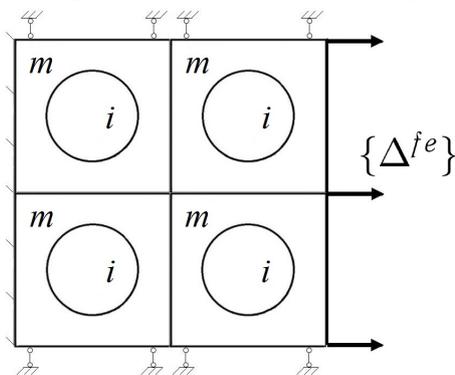


Рис. 5. Граничные условия, прикладываемые к модели 3-го уровня

Из решения системы

$$[K^{fe}] \{\Delta^{fe}\} = \{0\}$$

определены неизвестные компоненты вектора перемещений узлов модели 3-го уровня. Затем из линейных комбинаций рассчитанных напряженно-деформированных состояний, обеспеченных тестовыми граничными условиями (рис. 3), для каждой ячейки периодичности композита составлены векторы перемещений узлов модели 2-го уровня $\{\Delta_j^{fe}\}$,

где $j = 1, \dots, l$ — количество ячеек периодичности в композите. Таким образом, заключительным этапом в алгоритме трехуровневого моделирования является определение полей напряжений и деформаций в моделях 2-го и 3-го уровней.

Для модели 2-го уровня векторы деформации $\{\varepsilon^e\}$ и напряжений $\{\sigma^e\}$ определены соотношениями МКЭ. Для модели 3-го уровня векторы деформации $\{\varepsilon_j^{fe}\}$ и напряжений $\{\sigma_j^{fe}\}$ определены с использованием смесового метода.

Таким образом, построен четырехузловой конечный элемент из гетерогенного материала, объем которого соответствует ячейке периодичности композита, а также приведен алгоритм, который позволяет связать напряженно-деформированные состояния моделей 2-го и 3-го уровней. Построенный конечный элемент и разработанный алгоритм трехуровневого моделирования далее применен для расчета объекта из композита с периодической структурой.

Необходимо отметить, что описанный алгоритм связи напряженно-деформированных состояний моделей 2-го и 3-го уровней является универсальным и справедлив также и для случаев произвольного количества узлов и геометрии периодической ячейки материала.

В четвертой главе описан программный комплекс «ThermoMech-2D» — численный расчет эффективных термомеханических характеристик структурно-чувствительных композиционных материалов», предназначенный для трехуровневого моделирования термомеханических характеристик композита в двумерной постановке задач термоупругости и теплопроводности. В его основу положены метод конечных элементов и разработанный на основе принципов многосеточных методов численный алгоритм, связывающий конечно-элементные модели композита и объекта из него. Расчет термомеханических характеристик упрочняющих элементов композита — ОУНТ на 1-м уровне моделирования проведен по соотношениям, разработанным во 2-й главе.

Разработанный программный комплекс создан с использованием языка программирования Delphi, является кроссплатформенным и может быть скомпилирован под различные операционные системы (Windows, Linux, MacOS).

Код комплекса имеет модульную структуру, что позволяет оперативно расширять его функционал за счет встраивания новых модулей.

Ввиду аналогии последовательности численного решения задач упругости и теплопроводности подробно рассмотрена применимость разработанного программного комплекса к проведению трехуровневого моделирования упругости объекта из периодического композиционного материала.

Глобальная блок-схема структуры комплекса «ThermoMech2D» изображена на Рис. 6.



Рис. 6. Глобальная блок-схема структуры комплекса «ThermoMech2D»

Наличие своего сеткопостроителя является преимуществом разработанного программного комплекса, так как наличие конечно-элементной сетки не зависит от стороннего программного обеспечения (например, в случае «объединения» разработанного расчетного модуля и сторонней программы с открытым кодом, например, SALOME). Также проведение расчетов не требует материальных затрат на получение доступа к коду (в случае закрытого кода программного продукта, например, ANSYS).

На примере трехуровневого моделирования задачи упругости приведено описание основных модулей программного комплекса, их структура, для каждого из них описаны входные и выходные параметры.

Для верификации работы программного комплекса проведены модельные расчеты, результаты которых хорошо согласуются с известными аналитическими моделями и результатами расчетов в ANSYS.

В качестве примера расчета приведен результат трехуровневого моделирования объекта из периодического композита, упрочненного ОУНТ, к которому приложены кинематические граничные условия (Рис. 7).

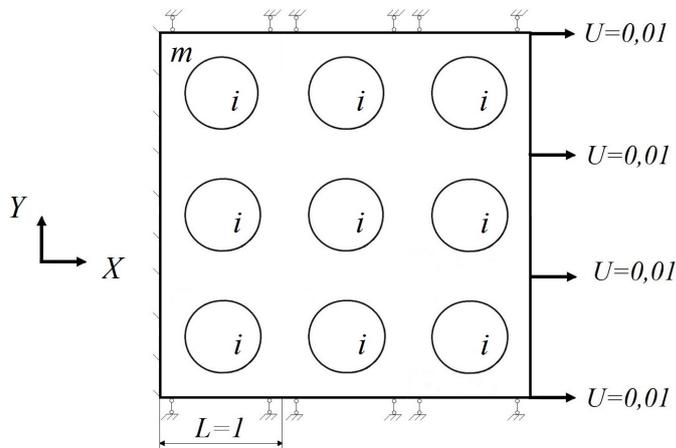


Рис. 7. Расчетная схема. L, U , мм

Условия закрепления тела таковы, что точкам, принадлежащим левой границе, запрещены перемещения в обоих направлениях, а точкам

на верхней и нижней гранях разрешены перемещения вдоль оси X , но запрещены перемещения вдоль оси Y (Рис. 7).

С использованием программного комплекса «ThermoMech2D» для такой системы на 3-м и 2-м уровне построены равномерные конечно-элементные сетки (Рис. 8, 9).

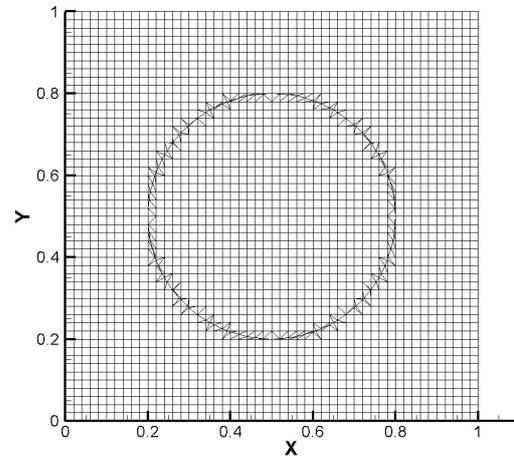
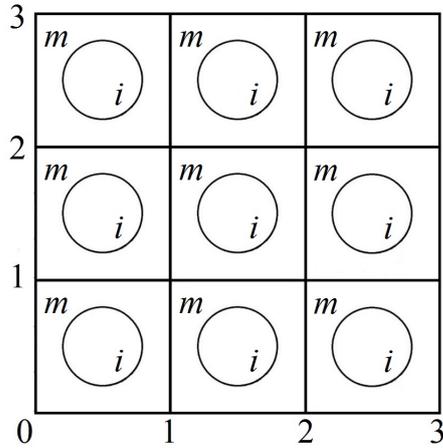


Рис. 8. Сетка модели 3-го уровня Рис. 9. Сетка модели 2-го уровня

Исходные данные об упругих характеристиках матрицы, конфигурации ОУНТ и упругих свойствах графена выбраны следующими $E^m = 68,00$ ГПа, $\nu^m = 0,35$, ОУНТ хиральности $(8, 0)$, $\bar{b} = 0,01$, $E^g = 1000,00$ ГПа, $\nu^g = 0,28$.

Для визуализации и оценки результатов трехуровневого моделирования также приведены кривые, построенные по наиболее широкоиспользуемым аналитическим моделям. Результаты проведенных вычислений в виде зависимостей модуля упругости E от концентрации C_V ОУНТ изображены на Рис. 10.

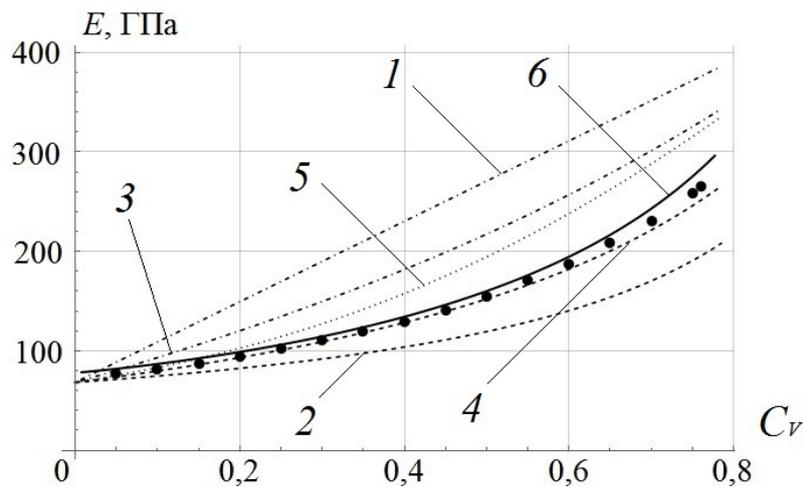


Рис. 10. Результаты трехуровневого моделирования в сравнении с известными аналитическими методами

На Рис. 10 изображены кривые: 1 и 2 — верхние и нижние оценки, полученные с помощью метода Фойгта-Рейсса, 3 и 4 — верхняя

и нижняя оценки, полученные с помощью метода Хашина-Штрикмана, 5 — оценки, полученные методом самосогласования, 6 — оценки, полученные методом Скудры-Булавса. Точками изображены оценки, полученные с использованием разработанного конечно-элементного программного комплекса «ThermoMech2D».

Как видно из Рис. 10, значения модуля упругости, полученные методом трехуровневого моделирования, находятся между верхними и нижними границами двусторонних оценок по методам Фойгта-Рейсса и Хашина-Штрикмана. Также необходимо отметить тенденцию сближения полученных значений с оценками по методу Скудры-Булавса и нижней границы по методу Хашина-Штрикмана.

Также проведен сравнительный анализ результатов, полученных с использованием «ThermoMech2D», со значениями, полученными в результате использования ANSYS. Установлено, что различие в результатах составляет менее 5 %.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. Разработан подход к построению трехуровневых математических моделей, описывающих термомеханические характеристики композитов, армированных наноструктурными элементами, связывающих напряженно-деформированные состояния объекта из нанокompозита с периодической структурой, такого материала и термоупругие характеристики компонент этого композита.

2. С использованием методов механики сплошной среды построена новая математическая модель, связывающая упругие характеристики ОУНТ с соответствующими свойствами графена, взятого за ее основу.

3. Разработан численный алгоритм, обеспечивающий связь напряженно-деформированных состояний моделей 2-го и 3-го уровней.

4. Для композита, обладающего свойством периодичности, с использованием принципов многосеточных методов получены соотношения, описывающие конечный элемент, соответствующий ячейке периодичности такого материала.

5. Создан конечно-элементный программный комплекс «ThermoMech2D» с модульной структурой для трехуровневого моделирования термомеханических характеристик нанокompозитов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОТРАЖЕНЫ В РАБОТАХ

1. Сергеева Е.С. Исследование упругих характеристик композита с эллипсоидальными включениями // Молодежный научно-технический

вестник. Электрон. журн. 2016. № 5. (1 п.л.)

2. Сергеева Е.С. Исследование упругих характеристик нанокompозитов // Молодежный научно-технический вестник. Электрон. журн. 2016. № 8. С. 8. (1,63 п.л.)

3. Магнитский И.В., Сергеева Е.С. Оценка влияния граничных условий на результаты осреднения упругих свойств однонаправленного композита // Конструкции из композиционных материалов. 2016. № 2. С. 59–63. (0,31 п.л./0,16 п.л.)

4. Зарубин В.С., Сергеева Е.С., Шишкина С.И. Оценки упругих свойств матрицы композита, упрочненной углеродными нанотрубками // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2016. № 9. С. 155–170. (1 п.л./0,33 п.л.)

5. Зарубин В.С., Сергеева Е.С. Исследование связи упругих характеристик однослойной углеродной нанотрубки и графена // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки. 2016. № 1. С. 100–110. (0,69 п.л./0,34 п.л.)

6. Сергеева Е.С. Математическое моделирование упругих характеристик композита, армированного шаровыми включениями // Математика и математическое моделирование. 2017. № 1. С. 11–24. (0,88 п.л.)

7. Зарубин В.С., Савельева И.Ю., Сергеева Е.С. Двусторонние оценки модулей упругости пористого твердого тела // Инженерный журнал: наука и инновации. Электрон. журн. 2017. № 12. (1,13 п.л./0,38 п.л.)

8. Zarubin V.S., Sergeeva E.S. Porosity influence of power generating equipment structural materials on its thermoelastic characteristics and thermal conductivity // IOP Conf. Series: Journal of physics: conf. series. 2017. V. 891. 012321. (0,44 п.л./0,22 п.л.)

9. Зарубин В.С., Зарубин С.В., Сергеева Е.С. Сравнительный анализ оценок коэффициента теплопроводности каркаса пористого твердого тела // Машиностроение и компьютерные технологии. 2017. № 7. С. 15–30. (1 п.л./0,33 п.л.)

10. Зарубин В.С., Новожилова О.В., Сергеева Е.С. Двусторонние оценки коэффициента теплопроводности каркаса пористого тела // Математика и математическое моделирование. 2018. № 3. С. 45–60. (1 п.л./0,33 п.л.)

11. Сергеева Е.С. Зависимость эквивалентных коэффициентов теплопроводности однослойной углеродной нанотрубки от ее хиральности // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки. 2018. № 2. С. 97–106.

(0,63 п.л.)

12. Zarubin V.S., Sergeeva E.S. Dependence of equivalent thermal conductivity coefficients of single-wall carbon nanotubes on their chirality // IOP Conf. Series: Journal of physics: conf. series. 2018. V. 991. 012080. (0,44 п.л./0,22 п.л.)

13. Zarubin V.S. Sergeeva E.S. Application of mathematical modeling to determine the thermoelastic characteristics of nano-reinforced composites // Mathematical models and computer simulations. 2018. V. 10. No. 3. P. 288–298. (0,69 п.л./0,34 п.л.)

14. Zarubin V.S., Sergeeva E.S. Mathematical modeling of structural-sensitive nanocomposites deformation // Computational mathematics and information technologies. 2018. V. 2. No. 1. P. 17–24. (0,5 п.л./0,25 п.л.)

15. Zarubin V.S., Savel'eva I. Yu., Sergeeva E.S. Estimates of equivalent heat conductivity coefficients of carbon nanotubes // Journal of engineering physics and thermophysics. 2018. V. 91. No. 5. P. 1274–1281. (0,5 п.л./0,17 п.л.)

16. Sergeeva E.S. Dependence of the elastic properties of a single-walled carbon nanotube on its chirality // Solid state phenomena. 2018. V. 284. P. 20–24. (0,31 п.л.)

17. Zarubin V.S., Sergeeva E.S. Effects of porosity of a composite reinforced with nanostructured inclusions on its thermoelastic characteristics // Mechanics of solids. 2018. V. 53. No. 6. P. 675–684. (0,63 п.л./0,32 п.л.)

18. Зарубин В.С., Сергеева Е.С. Трансверсально изотропный стержень, моделирующий упругие характеристики однослойной углеродной нанотрубки // Математика и математическое моделирование. 2019. № 1. С. 15–26. (0,75 п.л./0,38 п.л.)

19. Zarubin V. S., Sergeeva E. S. Mathematical modeling of the structure-sensitive composite elastic properties // AIP Conference proceedings. 2019. V. 2116, 380010. (0,31 п.л./0,16 п.л.)

20. Zarubin V.S., Savelyeva I.Yu., Sergeeva E.S. Estimates for the thermoelastic properties of a composite with ellipsoidal anisotropic inclusions // Mechanics of composite materials. 2019. V. 55. No. 4. P. 513–524. (0,75 п.л./0,25 п.л.)

21. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019614994. ThermoMech2D—численный расчет эффективных термомеханических характеристик структурно-чувствительных композиционных материалов / А.Э. Дворецкий, Е.С. Сергеева, И.В. Магнитский, Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 16.04.2019 г.