

*Г. И. Львов**

*Национальный технический университет “Харьковский политехнический институт”,
Харьков, Украина*

ЧИСЛЕННАЯ ГОМОГЕНИЗАЦИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВОЛОКНИСТЫХ КОМПОЗИТОВ

*G. I. Lvov**

NUMERICAL HOMOGENIZATION OF THE THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF FIBROUS COMPOSITES

Keywords: fibrous composites, thermal conductivity, thermal expansion, micromodeling

The paper presents a complex numerical technique that allows one to determine the tensors of thermal conductivity and thermal expansion for fibrous composites from a unified standpoint and using one software. The advantage of the technique developed is that it allows one to determine the thermal microstresses. Such stresses, self-balanced within representative volumes, arise even in a uniformly heated body whose displacements are not limited by external constraints. Consideration of the microstresses is important in a detailed analysis of the fracture mechanics of composite materials.

Ключевые слова: композиты волокнистые, теплопроводность, расширение температурное, микромоделирование

Представлена комплексная численная методика, позволяющая с единых позиций и на одном программном обеспечении определять компоненты тензоров теплопроводности и температурного расширения волокнистых композитов. Преимуществом разработанной методики является возможность определения температурных микронапряжений. Такие самоуравновешенные в пределах представительных объемов напряжения возникают даже в равномерно нагретом теле, перемещения которого не

*Автор, с которым следует вести переписку: lvovdpm@ukr.net
Corresponding author: lvovdpm@ukr.net

ограничиваются внешними связями. Учет микронапряжений важен при детальном анализе механики разрушения композитных материалов.

Введение

Композитные материалы наряду с высокими механическими характеристиками обладают и уникальными теплофизическими свойствами, в силу чего композиты находят всевозрастающее применение в самых передовых технологиях. Композитные структуры с низкой теплопроводностью используются в качестве изоляционных материалов в космических аппаратах. В системах охлаждения элементов микроэлектроники применяются композиты с заданными соотношениями коэффициентов теплопроводности в разных направлениях. Варьируя структуру армирования, можно изменять компоненты тензора температурного расширения вплоть до нулевых и отрицательных значений. Такие композиты применяются в прецизионных оптических системах, работающих в условиях высоких перепадов температур окружающей среды. Эти практические потребности вызывают значительный интерес к исследованиям теплофизических свойств композитных материалов. Большое значение в этом направлении имеют методы гомогенизации свойств теплопроводности и температурного расширения композитов. Так, в работе [1] предложена методика определения эффективных характеристик теплопроводности композитов с периодической структурой, с произвольным количеством фаз и любой формой включений. Процедура основана на использовании рядов Фурье для представления периодических изменяющихся полей температур и тепловых потоков. Подробно описаны микроструктурные особенности моделирования для трехфазных композитов с различными видами армирования. В качестве примеров рассмотрен композит, однонаправленно армированный двумя семействами волокон из разных материалов, а также трехфазная структура: матрица, круглое волокно и кольцевая переходная зона. Аналитические результаты разработанной методики сравнивали с численными результатами, полученными методом конечных элементов, а также с экспериментальными данными других авторов. Эти сравнения подтвердили эффективность методики для расчета макроскопических характеристик теплопроводности периодических композитов с множественными включениями.

В работе [2] предложена математическая модель прогнозирования эффективной теплопроводности композитов, упрочненных эллипсоидальными включениями. Трехфазная структура включает матрицу, включения и покрытия в форме коаксиальных эллипсоидов. На основе метода функций Грина предложена формулировка задачи, учитывающая несовершенство границы между включениями и окружающей матрицей. На основе решения интегрального уравнения получены аналитические выражения для определения эффективной теплопроводности и теплоемкости композита. Полученные результаты сравнивали с известными точными решениями для

отдельного цилиндрического и сферического включений. Способность модели хорошо описывать теплопроводность композитов с высокой объемной долей включений была проверена сравнением с численными результатами других авторов. Показано, что полученные результаты применимы и для высокой объемной доли включений. Отмечено также, что неидеальный интерфейс существенно влияет на эффективную проводимость композитов.

Упрощенная расчетная модель теплопроводности предложена в [3] для композитов, упрочненных частицами. Рассмотрены случаи с высокой объемной долей частиц, случайно распределенных в матрице. Реальная геометрическая структура заменяется множеством кубиков наполнителя и матрицы. Особенностью математической модели является учет взаимосвязи отдельных элементов наполнителя благодаря введению цепочек теплопередачи. Для математического задания таких цепочек вводятся специальные матрицы. Для реализации предложенной модели разработана программа в пакете MATLAB, где в качестве исходных данных задаются коэффициенты теплопроводности матрицы и наполнителя, а также структура путей теплопередач. В качестве примера проведены расчеты теплопроводности композита, в котором алюминиевый порошок является частицей наполнителя в базовой матрице эпоксидной смолы. Результаты прогнозирования этой модели достаточно хорошо согласуются с экспериментальными результатами в широком диапазоне температур при объемной доле наполнителя более 30 %.

Алюминий широко используется в различных отраслях современной промышленности. В некоторых конструкциях его применение сдерживается его низкой теплопроводностью. Перспективным направлением улучшения теплофизических характеристик алюминиевых композиций является упрочнение многослойными углеродными нанотрубками. В работе [4] предложена методика гомогенизации свойств теплопроводности композитов с алюминиевой матрицей, армированных углеродными нанотрубками. Созданы многомасштабные конечно-элементные модели, включающие нанотрубки, межфазные зоны и алюминиевую матрицу. Для численных исследований построены различные конфигурации упрочнения, включая случайно расположенные трубки, равномерно ориентированные, многоуровневые, связанные и объединенные в сеть. Углеродные нанотрубки моделируют как трансверсально-изотропные (в отношении теплопроводности) цилиндры, интерфейсную зону — в виде коаксиального полого цилиндра, идеально контактирующего с нанотрубкой и матрицей. Представительный объем включал в себя 100 нанотрубок, которые не контактируют друг с другом. Конечно-элементный анализ стационарной теплопроводности представительного объема выполнен в программном комплексе ABACUS. Обработка результатов этого анализа позволила установить влияние объемного содержания нанотрубок на коэффициенты теплопроводности для разных конфигураций упрочнения.

Углеродные нанотрубки обладают высокой теплопроводностью и поэтому используются в качестве наполнителей для полимерных композитов. В

работе [5] проведено многомасштабное моделирование процессов теплопередачи в композитах с эпоксидной матрицей, армированной углеродными нанотрубками. Для моделирования на наноуровне построены атомистические модели эпоксидного полимера и наполнителя, на которых выполнены исследования методами классической молекулярной динамики. На этом этапе основное внимание уделено оценке межфазной теплопроводности между полимером и наполнителями. На макроскопическом уровне проведена оценка эффективной теплопроводности композита путем анализа репрезентативных объемов. Углеродные трубки моделировали цилиндрами, хаотически распределенными в пределах кубического массива эпоксидной матрицы. Задачи стационарной теплопроводности решали методом конечных элементов в программном комплексе ABAQUS. Численное моделирование процессов теплопередачи в трех ортогональных направлениях показало, что коэффициенты теплопроводности неодинаковы разных направлениях. Учитывая стохастический характер ориентации нанотрубок, авторы ограничились вычислением среднего значения коэффициента теплопроводности. Исследование влияния объемной доли нанонаполнителей на эффективную теплопроводность показало, что для нанокompозитов с более высокой объемной долей наполнителей влияние диаметра трубок на повышение теплопроводности становится более значительным.

Технология создания композитных пленок, содержащих наноалмазы, на основе восстановленного оксида графена описана в [6]. Введение наноалмазов обеспечивает чрезвычайно высокую теплопроводность и возможность целенаправленно изменять анизотропию свойств теплопроводности пленок. Теплопроводность пленок в плоскостном и поперечном направлениях измеряли экспериментально методом лазерной вспышки. Исследования показали, что гибридные композиции обладают высокой степенью анизотропии свойств теплопроводности. Для разных пленочных структур коэффициент теплопроводности в плоскости пленок находился в пределах 500—1900 Вт/(м·К), а коэффициент теплопроводности в поперечном направлении оказался значительно меньше — 0,7—1,3 Вт/(м·К). Отношение компонентов тензоров теплопроводности в продольном и поперечном направлениях для конкретных типов композиций находилось в пределах 500—5000 и несущественно зависело от температуры испытаний.

Для предсказания эффективных физических свойств композитных материалов используют современные технологии искусственного интеллекта. Технологии обработки больших данных в сочетании с методами искусственного интеллекта применены в [7] для решения задач гомогенизации свойств теплопроводности композитных материалов. На этапе подготовки данных для обучения нейронных сетей использовали двухуровневый подход к гомогенизации плетеных композитов. На микроуровне определяли эффективные характеристики прядей, а на макроуровне находили компоненты тензора теплопроводности плетеного композита. Задачи стационарной теплопроводности представительной ячейки решали вариационно-асимптотическим методом и методом конечных элементов. В качестве примеров геометриче-

ской структуры упрочнения рассмотрены ткани полотняного, саржевого и сатинового плетения. Наборы данных численного моделирования использованы для обучения моделей нейронных сетей прогнозированию эффективной теплопроводности этих трех типов тканых композитов. Модели нейронной сети имеют входные характеристики разных типов: непрерывные величины — объемная доля волокна, геометрические параметры пряжи и физические свойства компонентов; дискретные входные данные — типы плетения. После процессов обучения модели искусственных нейронных сетей продемонстрировали хорошее согласование с результатами численного моделирования теплопроводности, а также более высокую вычислительную эффективность.

В работе [8] для прогнозирования эффективной теплопроводности композитных и пористых материалов применяли методы машинного обучения. В качестве исходных данных для обучения использовали структуры, сгенерированные [9] для пористых материалов со случайным распределением включений. При задании свойств матрицы и включений их предполагали изотропными, а соотношение между коэффициентами теплопроводности компонентов изменяли в широких пределах. Эффективные коэффициенты теплопроводности сгенерированных структур вычисляли методом решеток Больцмана. В работе использовали три методики машинного обучения: сверточную нейронную сеть, регрессию опорных векторов и регрессию гауссовского процесса. На большом числе примеров продемонстрирована возможность быстрого прогнозирования эффективной теплопроводности стохастически армированных композитов.

Численная методика предсказания свойств температурного расширения тканых композитов описана в [10]. Основное внимание уделено приёмам выделения представительных ячеек. Наряду с минимально возможными периодически повторяющимися ячейками рассмотрены и ячейки, состоящие из нескольких минимальных. Условия периодичности перемещений сформулированы для трансляционной, отражательной и поворотной симметрии структуры композита. При определении эффективных коэффициентов температурного расширения прядей их рассматривали как однонаправленно армированные композиты с гексагональной упаковкой волокон. Граничные условия для представительных ячеек выведены на основе предположения об однородном поле макродеформаций, что возможно при равномерном тепловом нагружении. Рассмотрено несколько вариантов плетеных композитов, армированных полотняной и сатиновой тканью. Термомеханический анализ представительных ячеек выполнен методом конечных элементов в программном комплексе ANSYS. В качестве результатов термомеханического анализа приведены распределения перемещений. Информация о напряженном состоянии приведена только в виде эквивалентных напряжений фон Мизеса.

Особенности формирования условий периодичности для конечно-элементного анализа температурного расширения композитов рассмотрены в работе [11] на разных видах представительного объема. Для композитов,

армированных сферическими частицами, построены представительные объемы с регулярно распределенными сферическими частицами. Рассмотрены четыре группы структур в зависимости от расположения частиц внутри объема. Для композитов, армированных произвольно распределенными цилиндрическими волокнами, геометрические модели генерируются с помощью специального алгоритма. Этот алгоритм обеспечивает стохастическое распределение и ориентацию волокон, но исключает пересечение волокон. При моделировании тканых композитов пряжи имеют эллипсоидальное поперечное сечение, а полотняное плетение образуется синусоидальными волнами прядей. Система условий периодичности гарантирует непрерывность напряжений и деформаций на противоположных поверхностях представительного объема для композитов со сферическими частицами и тканых композитов. Для структур, армированных хаотично расположенными волокнами, предложенный алгоритм обеспечивает энергетический баланс и самоуравновешенность температурных макронапряжений. Результаты сравнения с экспериментальными данными и результатами других численных методов подтвердили возможность прогнозировать коэффициенты температурного расширения предложенным алгоритмом.

Влияние термического расширения на процесс усадки композита с полистирольной матрицей, армированной стекловолокнами, теоретически и экспериментально исследовано в [12]. Теоретическая оценка модулей упругости и коэффициентов температурного расширения выполнена с использованием моделей Мори—Танака для случая регулярной упаковки волокон, имеющих эллипсоидальное поперечное сечение. Для экспериментального исследования усадки литьем под давлением изготавливали однонаправленно армированные композитные образцы. Внутреннюю структуру образцов исследовали методом микрокомпьютерной томографии. Сопоставление теоретических предсказаний по моделям Мори—Танака с результатами экспериментов показало, что прогнозы для эффективных коэффициентов температурного расширения композитов менее точны, чем прогнозы эффективных модулей упругости. Установлено, что объемное содержание волокон и соотношение размеров поперечного сечения волокна существенно влияют как на модули упругости, так и на коэффициенты температурного расширения композитов.

Теоретическое проектирование структур композитных материалов позволяет создавать модели, обладающие уникальными свойствами. К таким необычным характеристикам относится отрицательный коэффициент температурного расширения и отрицательный коэффициент Пуассона. В работе [13] построены плоские и пространственные модели решетчатых структур, состоящих из стержневых элементов. Для описания деформированного состояния этих решеток при механическом и температурном нагружении выведены упрощенные зависимости. Различные комбинации материала решетчатого армирования и его геометрической структуры приводит к изменению коэффициентов температурного расширения в желаемом направлении. В дополнение к приближенному аналитическому

анализу выполнено и конечно-элементное моделирование в программном комплексе ABAQUS. Линейные задачи термоупругого деформирования решетчатых структур решали с использованием 8-узловых линейных шестигранных элементов. Численный анализ выполняли на примере решетчатой структуры, состоящей из алюминиевых и медных стержней. В результате многовариантных расчетов получены зависимости коэффициентов температурного расширения для разных направлений, что позволяет спроектировать систему с отрицательными коэффициентами.

Многоуровневое моделирование теплового расширения композитов с карбидокремниевой матрицей, армированной углеродными волокнами, выполнено в работе [14] с учетом пористости керамики. На микроуровне углеродную пряжу рассматривали как однонаправленно армированный композит с разными схемами упаковки волокон. Построены периодически повторяющиеся ячейки с квадратной и гексагональной упаковками, а также для случайного расположения волокон. Для моделирования пористости в керамической матрице созданы пять видов представительных объемов с цилиндрическими и сферическими полостями. Геометрические модели мезоуровня включали три семейства взаимно перпендикулярных прядей, матрицу и межфазные зоны. Геометрическое моделирование выполнено с применением системы SOLIDWORKS, а задачи термоупругости решали в конечно-элементном программном комплексе ABAQUS. В конечно-элементном анализе периодические граничные условия реализованы путем задания линейных многоточечных уравнений связи. В результате численных исследований установлено, что морфологические характеристики пустот слабо влияют на свойства матрицы, но увеличение объема включений существенно снижает коэффициенты температурного расширения.

Для создания материалов с низкими коэффициентами теплового расширения и малой диэлектрической проницаемостью перспективными являются полимерные композиты с керамическими наполнителями. В [15] предложена технология изготовления композита, состоящего из эпоксидной смолы, нитевидных кристаллов оксида цинка и пористой оксид алюминиевой керамики. Сетчатые пористые композиты с низким содержанием керамики были приготовлены с использованием реплик полимерной губки и методов вакуумной пропитки. Физические свойства нового материала исследовали экспериментально. Прочность при изгибе и модуль упругости определяли по результатам испытаний образцов при трехточечном изгибе с использованием универсальной испытательной установки (СМТ6104, Китай). Коэффициенты температурного расширения рассчитывали на основе обработки кривых дилатометрии, полученных с помощью дилатометра (DIL 402PC, Германия). Установлено, что сетчатая структура эффективно уменьшает тепловое сопротивление за счет образования множества каналов теплопроводности в матрице даже при низкой объемной доле наполнителей.

Приведенный краткий обзор показывает, что для гомогенизации композитов привлекаются различные аналитические и численные методы. Более универсальными представляются численные методы, реализуемые с применением современных программных комплексов.

1. Теплопроводность и термоупругость эквивалентного гомогенного анизотропного материала

Большое распространение получили композитные материалы, имеющие регулярную структуру. В таких композитах можно выделить периодически повторяющийся представительный объем, размеры которого значительно меньше характерных размеров изделий из композитных материалов. Внутренняя структура представительного объема является гетерогенной, а составляющие её компоненты обладают разными физическими свойствами. Концепция гомогенизации предусматривает замену внутренней структуры композита некоторым эквивалентным однородным анизотропным материалом. Для этого реальные (микроскопические) параметры состояния и свойства в пределах представительного объема заменяются средними по объему (макроскопическими) характеристиками

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{V} \iiint Q dv.$$

В задачах рассматриваемого класса в качестве параметров Q используют скалярные, векторные и тензорные характеристики термомеханического состояния представительного объема.

В линейном приближении, когда можно пренебречь изменением плотности (и теплоемкости) в результате теплового расширения, задача нестационарной теплопроводности однородного анизотропного тела может быть описана уравнением [16], записанным относительно средних параметров:

$$\langle C \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = K_{ij} \frac{\partial^2 \langle T \rangle}{\partial x_i \partial x_j} + \langle F \rangle. \quad (1)$$

Здесь $\langle C \rangle$, $\langle T \rangle$, $\langle F \rangle$ — средние по представительному объему теплоемкость, температура и мощность внутреннего источника тепла; K_{ij} — компоненты тензора теплопроводности эквивалентного однородного материала. Компоненты вектора теплового потока в анизотропном материале определяем как [16]

$$\langle q_i \rangle = K_{ij} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x_j}. \quad (2)$$

Уравнения (1) должны быть дополнены начальными и граничными условиями, которые должны задаваться относительно средних значений температур или тепловых потоков.

Полная система уравнений термоупругости эквивалентного однородного анизотропного тела также должна быть записана относительно средних (макроскопических) характеристик напряженно-деформированного состояния:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \langle \sigma_{ij} \rangle + \langle X_i \rangle = 0,$$

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \langle u_j \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle u_i \rangle \right), \quad (3)$$

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = a_{ijkl} \langle \sigma_{kl} \rangle + a_{ij} \langle T \rangle.$$

Здесь $\langle \sigma_{ij} \rangle$, $\langle \varepsilon_{ij} \rangle$ — компоненты тензоров средних напряжений и деформаций; $\langle u_j \rangle$ — компоненты вектора средних перемещений; a_{ijkl} , a_{ij} — эффективные упругие постоянные и эффективные компоненты тензора температурного расширения композита.

Система уравнений (3) дополняется граничными условиями, задаваемыми относительно средних напряжений или перемещений в зависимости от условий закрепления на поверхности тела.

Для выполнения термомеханического анализа элементов конструкций из композитных материалов необходимо знать эффективные характеристики упругости, теплопроводности и температурного расширения композитов. Непосредственное определение этих параметров путем проведения физических экспериментов является весьма трудоемкой и не всегда осуществимой в полном объеме задачей. Альтернативная возможность заключается в теоретическом предсказании таких свойств на основе известных характеристик компонентов и структуры композита. В настоящей работе эта возможность реализована путем численного моделирования тепловых и деформационных процессов на микроуровне, т.е. в пределах представительного объема композита.

2. Численная процедура гомогенизации свойств теплопроводности композитов

Гомогенизация теплофизических свойств композитных материалов выполнена на трех типах углепластика. Рассмотрены два варианта однонаправленного армирования: с ортогональной и гексагональной упаковкой волокон, а также композит, армированный в двух перпендикулярных направлениях (рис. 1).

Для этих типов композита эквивалентный однородный материал является ортотропным (или трансверсально-изотропным). Если совместить координатные плоскости ортогональной декартовой системы координат с плоскостями симметрии композита, то тензор теплопроводности будет иметь диагональный вид. Тогда зависимость для вектора средних тепловых потоков удобно представить в матричной форме:

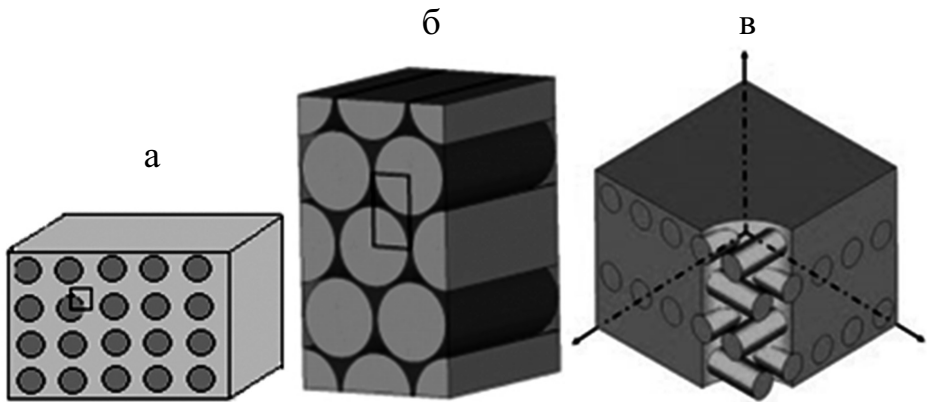


Рис. 1. Армирование однонаправленными (а, б) и взаимно перпендикулярными (в) волокнами.

$$\begin{bmatrix} \langle q_x \rangle \\ \langle q_y \rangle \\ \langle q_z \rangle \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \langle T \rangle \\ \frac{\partial}{\partial y} \langle T \rangle \\ \frac{\partial}{\partial z} \langle T \rangle \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Для определения компонентов тензора теплопроводности выполнена серия численных решений задачи стационарной теплопроводности для представительного объема композита. Матрицу и волокна рассматривали как изотропные. В областях, занятых ими, распределения температур удовлетворяют уравнению Лапласа

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0.$$

На границах между волокнами и матрицей задавали условия непрерывности температур и тепловых потоков

$$T_m = T_f, \quad K_m \frac{\partial T_m}{\partial n} = K_f \frac{\partial T_f}{\partial n},$$

где K_m , K_f — коэффициенты теплопроводности матрицы и волокон; n — направление нормали к границе между матрицей и волокном. Условия на границах представительного объема задавали таким образом, чтобы в каждом численном решении имитировался равномерный в среднем тепловой поток в неограниченном массиве композита по одному из направлений.

Для однонаправленно армированных композитов решали двухмерную задачу теплопроводности, а для ортогонально армированного композита

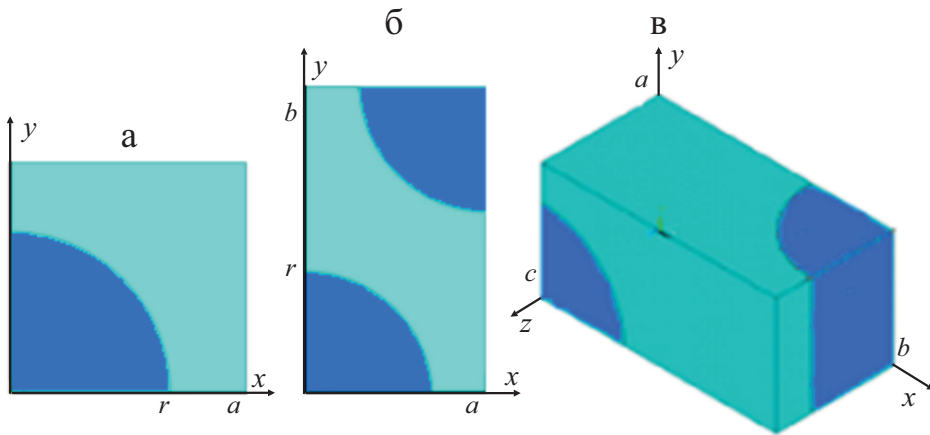


Рис. 2. Представительные ячейки для трех видов композита: квадратная (а), гексагональная упаковка волокон (б), ортогональное армирование (в).

та — трехмерную задачу. Области исследования для трех типов композита показаны на рис. 2.

Задачу стационарной теплопроводности решали методом конечных элементов в программном комплексе ANSYS. Все рассмотренные модели композитов состоят из эпоксидной матрицы и углеродных карбонизированных волокон. Физические свойства матрицы и волокон, необходимые для решения задач теплопроводности и термоупругости, представлены в табл. 1.

2.1. Определение коэффициентов теплопроводности однонаправленно армированных композитов. *Квадратная упаковка волокон.* При квадратной упаковке волокон композит обладает одинаковыми свойствами теплопроводности в поперечном направлении $K_x = K_y$. Эти коэффициенты определяли по результатам численного моделирования равномерного (в среднем) теплового потока по направлению оси Oy . Такому макропроцессу в композите соответствуют следующие условия на границах представительной ячейки:

$$y = 0, T = 0; \quad y = b, T = 100 \text{ } ^\circ\text{C}; \quad x = 0, q_x = 0; \quad x = a, q_x = 0.$$

Табл. 1

Физические свойства матрицы и волокон

Параметр	Волокно	Матрица
Модуль упругости E , ГПа	74,8	2,7
Коэффициент Пуассона ν	0,2	0,4
Коэффициент температурного расширения α , $1/^\circ\text{C}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-5}$
Коэффициент теплопроводности K , Вт/(м \cdot °C)	20	0,59

Эти условия задают средние значения компонентов градиента температуры в композите

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial y} \right\rangle = 100 \text{ } ^\circ\text{C/м}, \left\langle \frac{\partial T}{\partial x} \right\rangle = 0.$$

Для построения конечно-элементной модели использовали четырех-угольный конечный элемент PLANE77 с восемью узлами. Модель состояла из 16 122 элементов и 16 321 узла. Расчеты проводили для нескольких вариантов процентного содержания волокон композита данного типа. В этих вариантах стороны квадрата представительной ячейки оставались постоянными — $a = b = 1$, а относительный радиус r/a волокна изменялся.

Распределения температуры и теплового потока q_y при относительном радиусе волокна $r/a = 0,95$ показаны на рис. 3.

После решения задачи стационарной теплопроводности в постпроцессоре программного комплекса ANSYS вычисляли среднее значение теплового потока $\langle q_y \rangle$, а затем по соотношениям (4) находили компоненты тензора теплопроводности $K_y = K_x$. Для определения коэффициента теплопроводности в направлении армирования K_z можно воспользоваться правилом смесей

$$K_z = (K_f S_f + K_m S_m) / (ab), \quad (5)$$

где S_f , S_m — площадь поперечного сечения волокна и матрицы в представительной ячейке.

Гексагональная упаковка волокон. В отношении макроскопических свойств теплопроводности композиты такой структуры являются трансверсально-изотропными. Тензорный эллипсоид теплопроводности [16] является эллипсоидом вращения, ось симметрии которого совпадает с направлением армирования. В принятой системе координат тензор теплопроводности имеет диагональный вид с двумя независимыми компонен-

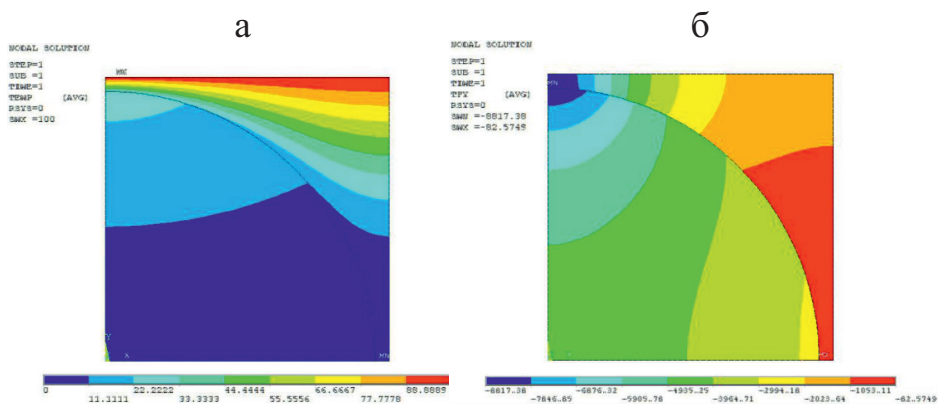


Рис. 3. Распределение температуры (а) и теплового потока (б) для квадратной упаковки.

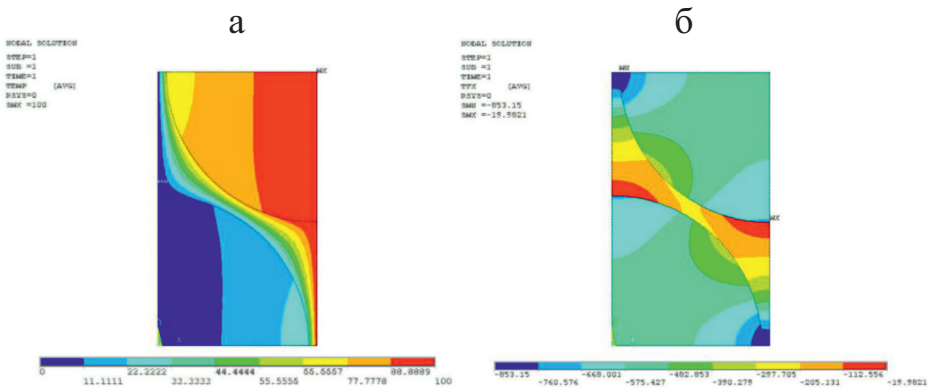


Рис. 4. Распределение температуры (а) и теплового потока (б) для гексагональной упаковки.

тами $K_x = K_y$, K_z . Для определения компонент $K_x = K_y$ выполняется численное решение двумерной задачи стационарной теплопроводности в пределах представительной ячейки, показанной на рис. 2—б. Равномерный в среднем тепловой поток в композите по направлению оси Ox моделируется заданием граничных условий

$$x = 0, T = 0; x = a, T = 100 \text{ } ^\circ\text{C}; y = 0, q_y = 0; x = b, q_y = 0.$$

Серию вычислений проводили, как и для квадратной упаковки волокон, методом конечных элементов при разных значениях относительного радиуса r/a волокон.

Распределения температуры и теплового потока q_x при относительном радиусе волокна $r/a = 0,95$ показаны на рис. 4. Среднее значение теплового потока $\langle q_x \rangle$ вычисляли в постпроцессоре программного комплекса ANSYS, а по соотношениям (4) находили компоненты тензора теплопроводности $K_x = K_y$. Последний компонент тензора теплопроводности рассчитывали по правилу смесей (5).

2.2. Определение коэффициентов теплопроводности ортогонально армированного композита. Численная гомогенизация свойств теплопроводности композита, армированного в двух ортогональных направлениях, требует решения пространственных задач стационарной теплопроводности для представительного объема, показанного на рис. 2—в. Размеры выделенного объема $b = 2$, $a = c = 1$. Для тепловых потоков направления вдоль осей Oz и Oy являются равноправными, а компоненты тензора теплопроводности K_z и K_y равны. Для моделирования равномерного (в среднем) теплового потока по направлению Ox на границах представительного объема заданы условия

$$x = 0, T = 0; x = b, T = 100 \text{ } ^\circ\text{C};$$

$$y = 0, q_y = 0; y = a, q_y = 0;$$

$$z = 0, q_z = 0; \quad z = c, q_z = 0.$$

Такие условия соответствуют средним значениям вектора градиента температуры в композите

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial x} \right\rangle = 50 \text{ } ^\circ\text{C}/\text{м}, \quad \left\langle \frac{\partial T}{\partial y} \right\rangle = 0, \quad \left\langle \frac{\partial T}{\partial z} \right\rangle = 0.$$

Для построения конечно-элементной модели использовали тетраэдральный 10-узловой конечный элемент SOLID87. Модель состояла из 12 936 элементов с 19 300 узлами. Расчеты проводили для нескольких вариантов процентного содержания волокон при разных значениях относительного радиуса волокон r/a . Распределения температуры и теплового потока q_x при $r/a = 0,95$ показаны на рис. 5.

После подсчета в постпроцессоре среднего в представительном объеме значения теплового потока $\langle q_x \rangle$ из соотношений (4) определяли первый компонент K_x тензора теплопроводности.

Для моделирования равномерного в среднем теплового потока по направлению оси Oy выполняли численное решение задачи стационарной теплопроводности при условиях на границе представительного объема

$$x = 0, q_x = 0; \quad x = b, q_x = 0;$$

$$y = 0, T = 0; \quad y = a, T = 100 \text{ } ^\circ\text{C};$$

$$z = 0, q_z = 0; \quad z = c, q_z = 0.$$

Такие условия соответствуют следующим средним значениям вектора градиента температуры в композите:

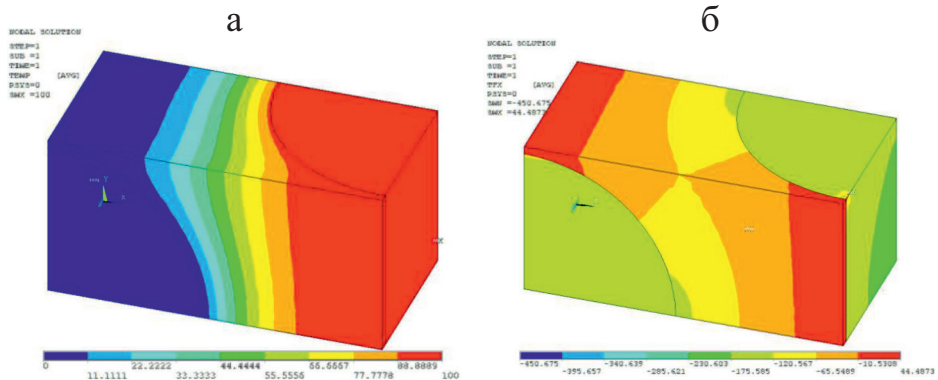


Рис. 5. Распределение температуры (а) и теплового потока q_x (б) для ортогонально армированного композита.

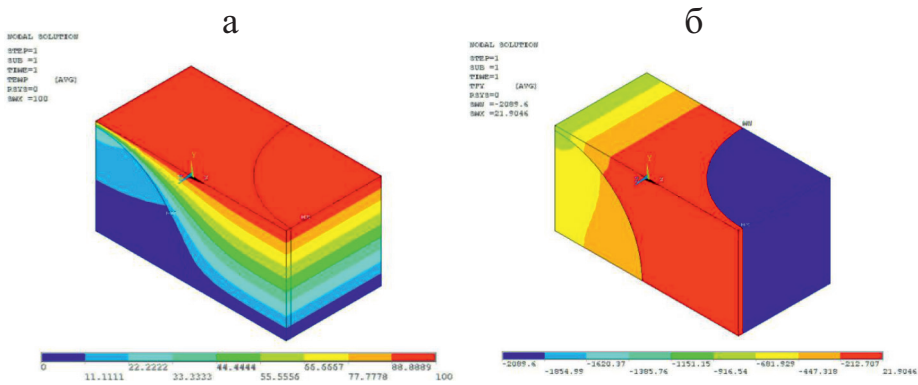


Рис. 6. Распределение температуры (а) и теплового потока q_y (б) для ортогонально армированного композита.

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial x} \right\rangle = 0, \quad \left\langle \frac{\partial T}{\partial y} \right\rangle = 100 \text{ } ^\circ\text{C/м}, \quad \left\langle \frac{\partial T}{\partial z} \right\rangle = 0.$$

Результаты решения этой модельной задачи представлены на рис. 6, где показаны распределения температуры и теплового потока q_y .

На основе решения этой задачи определялись компоненты тензора теплопроводности $K_y = K_z$.

Результаты численной гомогенизации характеристик теплопроводности однонаправленно и ортогонально армированных композитов с разным объёмным содержанием волокон Ψ представлены в табл. 2.

2.3. Температурное расширение и тепловые микронапряжения в композитах. Одним из проявлений анизотропии свойств композитных материалов является неодинаковость температурного расширения в разных направлениях. В рамках концепции гомогенизации средние (макроскопические) температурные деформации определяются тензором второго ранга α_{ij} . Для ортотропных структур в системе координат, совпадающей

Табл. 2

Коэффициенты теплопроводности для трех видов композитов (Вт/(м·°C))

r/a	Квадратная упаковка			Гексагональная упаковка			Ортогональная упаковка		
	$K_x=K_y$	K_z	Ψ	$K_x=K_y$	K_z	Ψ	K_x	$K_y=K_z$	Ψ
0,6	1,02	6,078	0,283	1,115	6,927	0,326	1,012	3,553	0,283
0,7	1,268	8,06	0,385	1,441	9,215	0,444	1,248	4,672	0,385
0,8	1,689	10,347	0,503	2,024	11,856	0,58	1,632	6,036	0,503
0,9	2,591	12,938	0,636	3,344	14,848	0,735	2,374	7,803	0,636
0,95	3,684	14,348	0,709	5,004	16,477	0,818	3,141	9,072	0,709

с плоскостями симметрии материала, средние температурные деформации сдвига отсутствуют, а линейные относительные удлинения задаются диагональным тензором второго ранга

$$\begin{bmatrix} \langle \varepsilon_x^T \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle \varepsilon_y^T \rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle \varepsilon_z^T \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_x & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_y & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_z \end{bmatrix} \times \langle T \rangle. \quad (6)$$

Для численного определения компонентов тензора температурного расширения композита разработана методика, позволяющая находить их на основе известных свойств матрицы и волокон. Предлагаемая методика заключается в численном решении специально сформулированных краевых задач термоупругости для представительных объемов композита. Преимущество подхода — возможность определения тепловых микронапряжений, возникающих в пределах представительного объема композита. Эти микронапряжения являются самоуравновешенными и появляются даже при отсутствии макронапряжений в композите. В частном случае, когда тело нагрето равномерно и не ограничено внешними связями, микронапряжения возникают из-за различия коэффициентов температурного расширения матрицы и волокон. Именно такое состояние необходимо смоделировать для определения компонентов тензора температурного расширения и тепловых микронапряжений. При таком моделировании во всем представительном объеме задается постоянная температура (принята равной 100 °С), а на границах объема задаются перемещения по специальной итерационной процедуре, обеспечивающей возможность расширения представительного объема без искажения его формы при выполнении условий самоуравновешенности микронапряжений. В рассмотренных далее примерах представительный объем имеет форму прямоугольного параллелепипеда до и после нагревания, а средние по объёму напряжения равны нулю.

Однонаправленный композит с квадратной упаковкой волокон. Решение задач термоупругости для представительной ячейки, показанной на рис. 2—а, выполняли с применением четырёхугольного конечного элемента PLANE 182 с четырьмя узлами. При анализе двухмерных задач использовали опцию — обобщенное плоское напряженное состояние при отсутствии осевого усилия, что эквивалентно требованию $\langle \sigma_z \rangle = 0$. Для данного типа композита направления x и y эквивалентны, поэтому для нахождения всех коэффициентов линейного расширения достаточно провести один численный эксперимент.

На границах ячейки $x=0$ и $y=0$ задавали условия симметрии, а на противоположных границах —

$$x = a, u_x = C, \tau_{xy} = 0; \quad y = b, u_y = C, \tau_{xy} = 0.$$

Значение константы C находили методом последовательных приближений до тех пор, пока среднее напряжение $\langle \sigma_x \rangle$ (как и $\langle \sigma_y \rangle$) не станет пренебрежимо малым. В качестве критерия достижения заданной точности использовали условие $\langle \sigma_x \rangle < \varepsilon \langle \sigma_x^0 \rangle$, где $\langle \sigma_x^0 \rangle$ — начальное приближение при $C = 0$. Физический смысл начального приближения соответствует нагреванию композита без возможности расширения. В расчетах параметр точности принимали равным $\varepsilon = 10^{-2}$.

По достижении сходимости итерационного процесса константа C позволяет определить среднюю температурную деформацию $\langle \varepsilon_x^T \rangle$, а с помощью соотношений (6) находят компоненты $\alpha_x = \alpha_y$. При анализе обобщенного плоского деформированного состояния среди результатов известна деформация $\langle \varepsilon_z^T \rangle$, что позволяет определить третий компонент α_z тензора температурного расширения.

Распределение тепловых микронапряжений в пределах представительной ячейки для композита с радиусом волокна $r/a=0,95$ показано на рис. 7.

Однонаправленный композит с гексагональной упаковкой волокон. Термоупругие свойства эквивалентного гомогенного материала для однонаправленно армированного композита удовлетворяют условиям трансверсальной изотропии. Плоскость изотропии совмещена с координатной плоскостью xOy , поэтому средние температурные деформации $\langle \varepsilon_x^T \rangle$ и $\langle \varepsilon_y^T \rangle$ равны между собой, как и два компонента тензора температурного расширения композита $\alpha_x = \alpha_y$. Для их определения выполняется решение задачи термоупругости для представительной ячейки, показанной на рис. 2—б. Для моделирования трансверсально-изотропного в среднем температурного расширения на границах ячейки задавали условия

$$x = a, u_x = C, \tau_{xy} = 0; \quad y = b, u_y = \sqrt{3}C, \tau_{xy} = 0,$$

а на линиях $x = 0$ и $y = 0$ — условия симметрии. Константа C должна быть задана таким образом, чтобы решение соответствовало процессу сво-

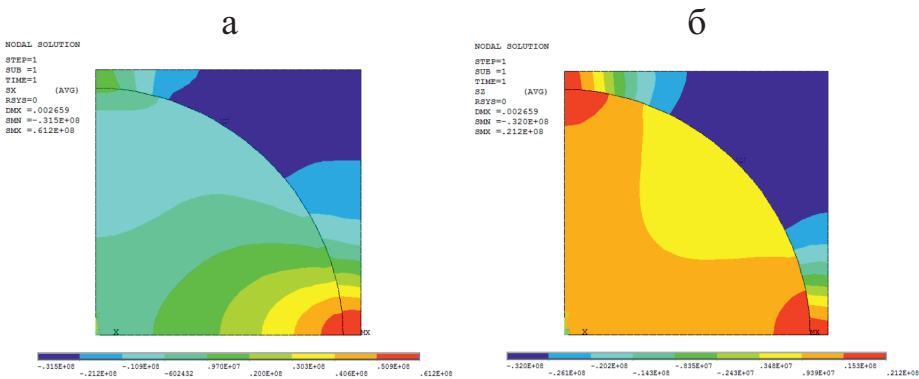


Рис. 7. Распределение координатных микронапряжений σ_x (а) и σ_z (б).

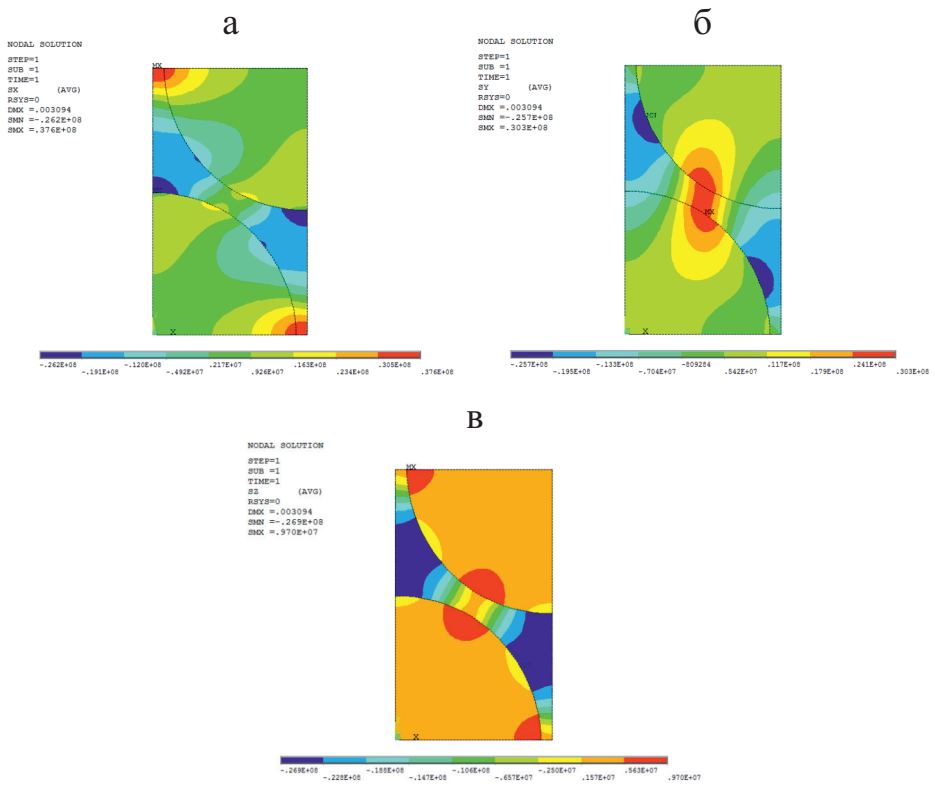


Рис 8. Распределение координатных микронапряжений σ_x (а), σ_y (б), σ_z (в).

бодного расширения композита при равномерном нагреве: $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$. Значение этой константы находили методом последовательных приближений аналогично изложенному для квадратной упаковки волокон. Третий компонент α_z тензора температурного расширения определялся деформацией в направлении армирования. Распределение тепловых микронапряжений в пределах представительной ячейки для композита с радиусом волокна $r/a = 0,95$ показано на рис. 8.

Несмотря на то что в отношении средних характеристик эквивалентный однородный материал является трансверсально-изотропным, величины и характер распределения микронапряжений σ_x и σ_y внутри представительной ячейки различаются. Это обстоятельство имеет существенное значение при анализе термпрочности композитных материалов. Подобная особенность наблюдается [17] и в отношении пластических свойств однонаправленно армированных композитов с гексагональной упаковкой волокон.

Ортогонально армированный композит. Для нахождения компонентов тензора температурных расширений ортогонально армированных композитов по изложенной процедуре требуется провести трёхмерный микромеханический анализ. Численные решения задач термоупругости выполняли для представительного объёма, показанного на рис. 2—в.

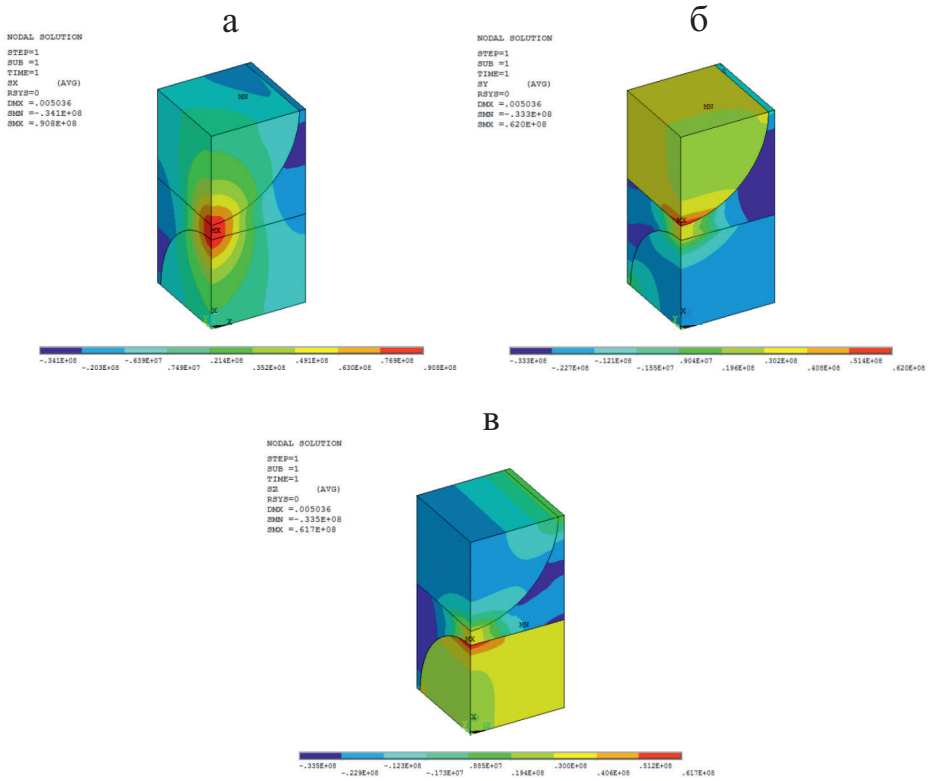


Рис. 9. Распределение координатных микронапряжений σ_x (а), σ_y (б), σ_z (в).

Конечно-элементную модель строили с использованием тетраэдрального 10-узлового элемента SOLID186. Для моделирования процесса нестеснённого расширения композита на границах представительного объема $x=0, y=0$ и $z=0$ задавали условия симметрии относительно соответствующих плоскостей. На остальных границах задавали условия

$$x=b: u_x = C_1, \tau_{xy} = 0, \tau_{xz} = 0;$$

$$y=a: u_y = C_2, \tau_{yx} = 0, \tau_{yz} = 0;$$

$$z=c: u_z = C_2, \tau_{zx} = 0, \tau_{zy} = 0.$$

В данном ортогонально армированном композите направления Oy и Oz равноправны, средние температурные деформации равны $\langle \varepsilon_z^T \rangle = \langle \varepsilon_y^T \rangle$, как и соответствующие компоненты тензора температурного расширения $\alpha_z = \alpha_y$. Две независимые константы C_1 и C_2 определяли методом последовательных приближений. Итерационный процесс продолжался до тех пор, пока условия самоуравновешенности температурных напряжений $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle = \langle \sigma_z \rangle = 0$ не будут выполнены с заданной точностью. По достижении сходимости итерационного процесса определяли средние

Коэффициенты температурного расширения ($10^{-5} 1/^\circ\text{C}$) трех видов
КОМПОЗИТОВ

r/a	Квадратная упаковка		Гексагональная упаковка		Ортогональная упаковка	
	$\alpha_x = \alpha_y$	α_z	$\alpha_x = \alpha_y$	α_z	α_x	$\alpha_y = \alpha_z$
0,6	4,66	0,918	4,68	9,36	12,15	1,722
0,8	3,3	0,685	3,027	6,054	8,37	1,27
0,9	2,42	0,621	2,075	4,15	5,89	1,085
0,95	1,88	0,598	1,547	3,09	4,69	0,965

температурные деформации $\langle \varepsilon_x^T \rangle = C_1 / b$, $\langle \varepsilon_y^T \rangle = C_2 / a$, а затем и компоненты тензора теплопроводности α_x и α_y .

При равномерном нагреве свободно расширяющегося композита в пределах представительного объёма возникают температурные микронапряжения, распределение которых показано на рис. 9 ($r/a = 0,95$).

По изложенным методикам для каждого типа армирования выполнена серия расчетов при разных значениях r/a . Компоненты тензора температурного расширения однонаправленно и ортогонально армированных композитов представлены в табл. 3.

Все приведенные в разделе 2.3 величины напряжений соответствуют повышению температуры композита на 100°C . В силу линейности задачи несложно оценить напряжения при иной тепловой нагрузке. Линейная постановка остается справедливой и в случае, когда физические свойства волокон и матрицы будут зависеть от температуры.

Заключение

Разработан единый подход к численной гомогенизации теплофизических свойств волокнистых композитов, необходимой для выполнения термомеханического анализа изделий из композитных материалов. В совокупности с работами [18, 19], посвященными гомогенизации упругих свойств, излагаемая методика позволяет с единых позиций и с применением одинаковых программных средств предсказывать все термомеханические характеристики композитов. Рассмотрены три типа композитов регулярной структуры, в которых можно выделить периодически повторяющийся элементарный объём.

Предсказание эффективных свойств теплопроводности и коэффициентов линейного расширения композита выполняется на основе заданной структуры армирования, а также известных физических характеристик матрицы и волокон. Для рассмотренных симметричных структур эквивалентные гомогенные материалы являются ортотропными или трансверсально-изотропными.

Для определения эффективных компонентов тензора теплопроводности композита выполнены численные решения задач стационарной теплопро-

водности в пределах периодически повторяющегося представительного объема. Граничные условия на поверхностях этого объема задавали таким образом, чтобы точно воспроизвести равномерный в среднем тепловой поток для неограниченного массива композита.

Эффективные значения компонентов тензора температурных расширений композита определяли на основе численного решения задач термоупругости для представительного объема. В качестве тепловой нагрузки использовали равномерное повышение температуры композита. Граничные условия моделировали такое состояние представительного объёма, которое реализуется при нестесненном расширении неограниченного массива композита. Для этого требовалось задавать перемещения на границах, обеспечивающие неизменность формы представительного объёма и самоуравновешенность температурных напряжений.

Достоинством предложенного подхода является возможность нахождения не только коэффициентов расширения, но и температурных микронапряжений, возникающих даже при равномерном нестесненном нагреве композита.

При анализе температурных напряжений в элементах конструкций из композитных материалов используют усредненные (эффективные) характеристики. При этом могут возникать и макроскопические напряжения, вызванные, например, неравномерностью поля температуры или механическими нагрузками. Суперпозиция микро- и микронапряжений может вызвать локальные повреждения, особенно при циклических нагрузках.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lages E. N., Marques S. P. C.* Prediction of effective thermal conductivity of multiphase composites with periodic microstructures using an expanded micromechanical model // *Int. J. Thermal Sci.* — 2022. — Vol. 171, Jan. — Article 107226.
2. *Bonfoha N., Jeancolasa A, Dinzarta F., Sabara H., Mihalutab M.* Effective thermal conductivity of composite ellipsoid assemblages with weakly conducting interfaces // *Compos. Struct.* — 2018. — Vol. 202. — P. 603—614.
3. *Chatterjee A., Vermaa R., Umashankara H.P., Kasthuriengana S., Shivaprakashb N. C., Beheraa U.* Heat conduction model based on percolation theory for thermal conductivity of composites with high volume fraction of filler in base matrix // *Int. J. Thermal Sci.* — 2019. — Vol. 136. — P. 389—395.
4. *Zhou L., Yuan T. B., Yang X. S., Liu Z. Y., Wang Q. Z., Xiao B. L., Ma Z. Y.* Micro-scale prediction of effective thermal conductivity of CNT/Al composites by finite element method // *Int. J. Thermal Sci.* — 2022. — Vol. 171, Jan. — Article 107206.
5. *Vahedi A, Lahidjani M. H. S., Shakhesi S.* Multiscale modeling of thermal conductivity of carbon nanotube epoxy nanocomposites // *Accepted Manuscript. Phys. B: Phys. Condensed Matter.* — 2018. — Vol. 550. — P. 39—46.
6. *Yuan H.-C, Lee C.-Y., Tai N.-H.* Extremely high thermal conductivity of nanodiamond-polydopamine/thinlayer graphene composite films // *Compos. Sci. Technol.* — 2018. — Vol. 167. — P. 313—322.
7. *Liu X., Peng B., Yu W.* Multiscale modeling of the effective thermal conductivity of 2D woven composites by mechanics of structure genome and neural networks // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* — 2021. — Vol. 179. — Article 121673.

8. *Wei H., Zhao S., Rong Q., Bao H.* Predicting the effective thermal conductivities of composite materials and porous media by machine learning methods // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* — 2018. — Vol. 127. — P. 908–916.
9. *Wang M., Wang J., Pan N., Chen S.* Mesoscopic predictions of the effective thermal conductivity for microscale random porous media // *Phys. Rev. E. Stat. Nonlinear Soft Matter Phys.* — 2007. — Vol. 75. — Article 036702.
10. *Goua J.-J., Gong C.-L., Gou L.-X., Lib S., Taoc W.-Q.* The unit cell method in predictions of thermal expansion properties of textile reinforced composites // *Compos. Struct.* — 2018. — Vol. 195. — P. 99–117.
11. *Tian W., Chao X., Fu M.W., Qi L., Ju L.* New numerical algorithm for the periodic boundary condition for predicting the coefficients of thermal expansion of composites // *Mech. Mater.* — 2021. — Vol. 154. — Article 103737/
12. *Lee D., Song Y. S.* Modeling the effects of elastic modulus and thermal expansion coefficient on the shrinkage of glass fiber reinforced composites // *Composites: Part B.* — 2018. — Vol. 146 — P. 98–105.
13. *Li J., Yang Q., Wei Y., Huang N., Tao R.* A synergistic design of composite metamaterial with drastically tailorable thermal expansion and Poisson's ratio // *Compos. Struct.* — 2021. — Vol. 275. — Article 114446
14. *Sun Z., Shan Z., Shao T., Li J., Wu X.* A multiscale modeling for predicting the thermal expansion behaviors of 3D C/SiC composites considering porosity and fiber volume fraction // *Ceramics Int.* — 2021. — Vol. 47, Iss. 6. — P. 7925–7936.
15. *Wua B., Chena R., Fua R., Agathopoulos S., Sua X., Liua H.* Low thermal expansion coefficient and high thermal conductivity epoxy/Al₂O₃/T-ZnOw composites with dual-scale interpenetrating network structure // *Composites: Part A.* — 2020. — Vol. 137. — Article 105993.
16. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости. — М.: Наука, 1987. — 246 с.
17. *Lvov G. I.* Using the concept of imposed constraints in the plasticity theory of composites // *Mech. Compos. Mater.* — 2021. — Vol. 57, No. 3. — P. 337–348.
18. *Lvov G. I., Kostromitskaya O. A.* Two-level computation of the elastic characteristics of woven composites // *Mech. Compos. Mater.* — 2018. — Vol. 54, No. 5. — P. 577–590.
19. *Daryazadeh S., Lvov G., Tajdari M.* A New numerical procedure for determination of effective elastic constants in unidirectional composite plates // *J. Solid Mech.* — 2016. — Vol. 8, No. 1. — P. 104–115.

Поступила в редакцию 28.02.2022
Received Feb. 28, 2022
