

DOI: 10.7242/1999-6691/2017.10.4.29

УДК 539.3

## КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ АНИЗОТРОПНЫХ УПРУГИХ МАТЕРИАЛОВ СО СЛУЧАЙНОЙ НАНОРАЗМЕРНОЙ ПОРИСТОСТЬЮ

А.В. Наседкин, А.С. Корниевский

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация*

Представлен комплексный подход к определению эффективных свойств анизотропных пористых упругих материалов со стохастической наноразмерной структурой пористости, включающий метод эффективных модулей механики композитов, моделирование представительных объемов и метод конечных элементов. Наноразмерность пор вводится в постановку задачи путем использования модели Гуртина–Мурдоха поверхностных напряжений на границах материала с порами. Общая методология отыскания эффективных свойств пористой среды продемонстрирована на двухфазном композите со специальными условиями, налагаемыми на скачки напряжений на границах раздела фаз. Описаны постановки краевых задач и результирующие формулы для вычисления полного набора эффективных констант двухфазного композита с произвольными типами анизотропии фаз и поверхностных свойств; сформулированы обобщенные постановки и приведены конечно-элементные аппроксимации. Отмечается, что задачи гомогенизации среды решаются с помощью известного конечно-элементного программного обеспечения при выборе для учета поверхностных межфазных напряжений оболочечных конечных элементов с опциями мембранных напряжений. Показано, что процедуры гомогенизации пористых композитов с поверхностными напряжениями могут рассматриваться как частные случаи соответствующих процедур для двухфазных композитов с межфазными напряжениями при пренебрежимо малых модулях жесткости нановключений. Конкретная реализация обсуждаемого подхода выполнена в конечно-элементном программном комплексе ANSYS. Описан алгоритм автоматического нахождения межфазных границ и размещения на них оболочечных элементов, сохраняющий работоспособность при различных размерах представительных объемов, построенных в форме кубической решетки из гексаэдральных конечных элементов. Алгоритм апробирован на моделях пористого материала гексагональной сингонии, отличающихся друг от друга значениями поверхностных модулей, пористостью и количеством пор. Выявлено влияние величины площади межфазных границ на эффективные модули пористого материала наноразмерной структуры.

*Ключевые слова:* пористый упругий композит, наноразмерные поры, модель Гуртина–Мурдоха, поверхностные напряжения, эффективные модули, моделирование представительных объемов, метод конечных элементов

## FINITE ELEMENT MODELING OF EFFECTIVE PROPERTIES OF ELASTIC MATERIALS WITH RANDOM NANOSIZED POROSITY

A.V. Nasedkin and A.S. Kornievsky

*Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation*

An integrated approach for determination of the effective properties of anisotropic porous elastic materials with a nanoscale stochastic porosity structure is presented. This approach includes an effective moduli method of composite mechanics, modeling of representative volumes and finite element method. The Gurtin–Murdoch model of surface stresses on the boundaries between material and pores is used for taking into account the nanodimension of pores. The general methodology for determination of the effective properties of porous composites is demonstrated for a two-phase composite with special conditions of stresses discontinuity on the phase interfaces. The mathematical statements of boundary value problems and the resulting formulae to determine the complete set of effective constants of the two-phase composites with arbitrary anisotropy and surface properties are described; the generalized statements is formulated and the finite element approximations are given. It is noted that the homogenization problem for the composites under study can be solved using the known finite element software and choosing the shell finite elements with the options of membrane stiffness only for taking into consideration the surface interphase stresses. It is also shown that the homogenization procedures for porous composites with surface stresses can be considered as special cases of the corresponding procedures for two-phase composites with interphase stresses if the stiffness moduli of nano-inclusions are negligibly small. The specific realization of these approaches is made in the finite element package ANSYS. An algorithm for automatic determination of interphase boundaries and location of shell elements on them, which works for different sizes of representative volumes, built in the form of a cubic lattice of hexahedral finite elements, is described. The efficiency of the algorithm has been tested using the models of porous material of hexagonal system at different values of surface moduli, porosity and number of pores. Simulations have revealed the influence of the area of the value of interphase boundaries on the effective moduli of the porous material with nanosized structure.

*Key words:* porous elastic composite, nanosized pores, Gurtin–Murdoch model, surface stress, effective moduli, modeling of representative volumes, finite element method

### 1. Введение

Как известно, для наноразмерных тел наблюдается масштабный эффект, приводящий к изменению эффективных жесткостей и других материальных модулей по сравнению с соответствующими для тел макроразмеров. Среди различных подходов, объясняющих этот феномен, в настоящее время широко применяются модели теории поверхностной упругости, о чем можно судить, например, по обзорам [1–4]. В популярной сейчас модели Гуртина–Мурдоха [5] на границы наноразмерного тела добавляются упругие мембраны, внутренние усилия в которых обуславливаются поверхностными напряжениями. Упругие мембраны можно разместить и внутри составного тела на границе раздела фаз, что позволяет моделировать

несовершенства этих границ, связанные со скачками напряжений [6–9]. Модель Гуртина–Мурдоха неоднократно использовалась и для описания упругих наноразмерных композитов. Так, в [10–18] и других в рамках теории упругости с поверхностными напряжениями изучались механические свойства композитов со сферическими нановключениями (нанопорами), а также волокнистых и других нанокompозитов. Техника конечно-элементных аппроксимаций для упругих материалов с поверхностными эффектами и примеры расчетов представлены в [8, 19–23] и других.

В данной работе исследуются анизотропные упругие материалы со случайно расположенными нанопорами. Пористый композитный материал считается предельным случаем двухфазного смесового композита, когда материал второй фазы имеет пренебрежимо малые модули жесткости. Введение в постановку наноразмерности на границах материала с порами осуществляется по модели Гуртина–Мурдоха поверхностных напряжений. Описывается математическая постановка задачи гомогенизации двухфазных анизотропных композитов со специальными условиями, налагаемыми на скачки напряжений на границах раздела фаз, и получены результирующие формулы для вычисления полного набора эффективных констант двухфазного композита с произвольными типами анизотропии фаз и поверхностных модулей. Указывается, что процедуры гомогенизации пористых композитов с поверхностными напряжениями могут пониматься как частные случаи соответствующих процедур для двухфазных композитов с несовершенствами на границах фаз при пренебрежимо малых модулях жесткости нановключений. Приведены конечно-элементные аппроксимации задач гомогенизации и отмечается, что задачи гомогенизации рассматриваемых композитов можно решать с помощью известного конечно-элементного программного обеспечения при условии выбора для учета поверхностных межфазных напряжений оболочечных конечных элементов с опциями мембранных напряжений.

Реализация представляемого подхода выполнена в конечно-элементном программном комплексе ANSYS с использованием его командного языка APDL. Модель представительного объема построена в форме кубического объема, равномерно разбитого на кубические конечные элементы, часть из которых объявлена порами. Описан алгоритм автоматического определения межфазных границ и размещения на них оболочечных элементов, сохраняющий работоспособность при различных размерах представительных объемов, построенных в форме кубической решетки гексаэдральных упругих конечных элементов. Алгоритм опробован на моделях пористого бериллия гексагональной сингонии, отличающихся значениями поверхностных модулей, пористостью и количеством пор. Как и в [1, 14, 15, 19–21], выявлено влияние величины площади межфазных границ на эффективные модули пористого материала наноразмерной структуры.

## 2. Методы эффективных модулей и конечных элементов для определения свойств двухфазных нанокompозитов

Рассмотрим представительный объем  $\Omega$  двухфазного композитного тела с наноразмерными включениями. При этом  $\Omega = \Omega^{(1)} \cup \Omega^{(2)}$ , где  $\Omega^{(1)}$  — объем, занимаемый основным материалом первой фазы (матрицей),  $\Omega^{(2)}$  — совокупность объемов, занимаемых материалом второй фазы (включениями). Введем обозначения:  $\Gamma = \partial\Omega$  — внешняя граница объема  $\Omega$ ;  $\Gamma^s$  — совокупность пограничных поверхностей материалов различных фаз ( $\Gamma^s = \partial\Omega^{(1)} \cap \partial\Omega^{(2)}$ );  $\mathbf{n}$  — вектор единичной нормали к границе, внешней по отношению к  $\Omega^{(1)}$ , то есть к области, занимаемой материалом матрицы;  $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$  — радиус-вектор точки в декартовой системе координат. Будем считать, что объемы  $\Omega^{(1)}$  и  $\Omega^{(2)}$  заполнены разными анизотропными упругими материалами. Тогда в рамках классической статической линейной теории упругости будем иметь следующую систему определяющих уравнений:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^*(\nabla) \cdot \mathbf{T} &= 0, & 1 \\ \mathbf{T} &= \mathbf{c} \cdot \mathbf{S}, & 2 \\ \mathbf{S} &= \mathbf{L}(\nabla) \cdot \mathbf{u}, & 3 \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$\mathbf{L}^*(\nabla) = \begin{bmatrix} \partial_1 & 0 & 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 \\ 0 & \partial_2 & 0 & \partial_3 & 0 & \partial_1 \\ 0 & 0 & \partial_3 & \partial_2 & \partial_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \nabla = \begin{Bmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{Bmatrix}; \quad (2)$$

$\mathbf{T} = \{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{13}, \sigma_{12}\}$  — массив, состоящий из компонент тензора напряжений  $\sigma_{ij}$ ;  $\mathbf{c}$  — матрица упругих жесткостей размером  $6 \times 6$ ;  $\mathbf{S} = \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, 2\varepsilon_{23}, 2\varepsilon_{13}, 2\varepsilon_{12}\}$  — массив компонент тензора деформаций  $\varepsilon_{ij}$ ;  $\mathbf{T} = \mathbf{T}^{(j)}$ ,  $\mathbf{c} = \mathbf{c}^{(j)}$ ,  $\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(j)}$  при  $\mathbf{x} \in \Omega^{(j)}$ ;  $\mathbf{u}$  — вектор перемещений; символ \* указывает на операцию транспонирования матриц и векторов.

В соответствии с моделью Гуртина–Мурдоха примем, что на наноразмерных границах раздела фаз выполняется условие:

$$\mathbf{L}^*(\mathbf{n}) \cdot [\mathbf{T}] = \mathbf{L}^*(\nabla^s) \cdot \mathbf{T}^s, \quad \mathbf{x} \in \Gamma^s. \quad (3)$$

Здесь:  $[\mathbf{T}] = \mathbf{T}^{(1)} - \mathbf{T}^{(2)}$  — скачок напряжений через границу раздела фаз;  $\nabla^s$  — поверхностный набла-оператор  $\nabla^s = \nabla - \mathbf{n} \partial / \partial r$ ;  $r$  — координата, отсчитываемая по нормали к  $\Gamma^s$ ;  $\mathbf{T}^s = \{\sigma_{11}^s, \sigma_{22}^s, \sigma_{33}^s, \sigma_{23}^s, \sigma_{13}^s, \sigma_{12}^s\}$  — массив компонент тензора поверхностных напряжений.

Для поверхностных напряжений примем «поверхностный» закон Гука

$$\mathbf{T}^s = \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{S}^s, \quad \mathbf{S}^s = \mathbf{L}(\nabla^s) \cdot \mathbf{u}^s, \quad \mathbf{u}^s = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}^*, \quad (4)$$

где  $\mathbf{c}^s$  — матрица  $6 \times 6$  поверхностных модулей упругих жесткостей;  $\mathbf{S}^s = \{\varepsilon_{11}^s, \varepsilon_{22}^s, \varepsilon_{33}^s, 2\varepsilon_{23}^s, 2\varepsilon_{13}^s, 2\varepsilon_{12}^s\}$  — массив, состоящий из компонент тензора поверхностных деформаций  $\varepsilon_{ij}^s$ ;  $\mathbf{u}^s$  — вектор поверхностных перемещений;  $\mathbf{I}$  — единичная матрица размером  $3 \times 3$ .

Будем считать, что объемные и поверхностные потенциальные энергии тела положительно определены относительно компонент тензоров деформаций, содержащихся в массивах  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{S}^s$  соответственно. Это требование влечет за собой симметрию и положительную определенность матриц жесткостей  $\mathbf{c}$  и  $\mathbf{c}^s$ , причем также относительно массивов  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{S}^s$ , соответственно.

Более точно поверхностные величины можно описать в локальной системе координат, связанной с отдельной точкой  $\mathbf{x} \in \Gamma^s$  тангенциальными ортами  $\tilde{\mathbf{e}}_1 = \boldsymbol{\tau}_1$ ,  $\tilde{\mathbf{e}}_2 = \boldsymbol{\tau}_2$  и нормалью  $\tilde{\mathbf{e}}_3 = \mathbf{n}$  к  $\Gamma^s$ . В этой системе  $\mathbf{u}^s = \{\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, 0\}$ ,  $\nabla^s = \{\tilde{\partial}_1, \tilde{\partial}_2, 0\}$ ,  $\mathbf{S}^s = \{\tilde{\varepsilon}_{11}, \tilde{\varepsilon}_{22}, 0, 0, 0, 2\tilde{\varepsilon}_{12}\}$ , и должна быть положительно определена входящая в матрицу поверхностных модулей упругости  $\mathbf{c}^s$  подматрица размером  $3 \times 3$  следующей симметричной структуры:

$$\begin{bmatrix} \tilde{c}_{11}^s & \tilde{c}_{12}^s & \tilde{c}_{16}^s \\ & \tilde{c}_{22}^s & \tilde{c}_{26}^s \\ \text{sym} & & \tilde{c}_{66}^s \end{bmatrix}.$$

Для отыскания эффективных жесткостей  $\mathbf{c}^{\text{eff}}$  рассматриваемого композита на границе представительного объема  $\Gamma$  зададим стандартные для теории эффективных модулей краевые условия первого рода:

$$\mathbf{u} = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (5)$$

где  $\mathbf{S}_0 = \{\varepsilon_{011}, \varepsilon_{022}, \varepsilon_{033}, 2\varepsilon_{023}, 2\varepsilon_{013}, 2\varepsilon_{012}\}$ , при этом  $\varepsilon_{0ij}$  — некоторые не зависящие от  $\mathbf{x}$  величины. Тогда формулы  $\mathbf{u} = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0$ ,  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_0$ ,  $\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 = \mathbf{c}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_0$  дадут решение краевой задачи (1)–(5) в объеме  $\Omega$ , заполненном однородной средой с постоянными модулями жесткости  $\mathbf{c} = \mathbf{c}^{\text{eff}}$  при отсутствии межфазной границы  $\Gamma^s$ , и поэтому без граничных условий (3), (4).

Отметим, что задача (1)–(5) для композитной среды отличается от обычных задач линейной теории упругости только наличием на интерфейсах фаз граничных условий (3), (4), характерных для наноразмерных тел, описываемых моделью Гуртина–Мурдоха.

Для численного решения задачи (1)–(5) перейдем к ее слабой (или обобщенной) постановке. Применяя стандартные преобразования, включающие умножение уравнения (1)<sub>1</sub> на произвольную функцию  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x})$ , интегрирование полученного равенства по объему  $\Omega$ , использование теорем о дивергенции и формул (1)–(4), приходим к следующему:

**О п р е д е л е н и е.** Слабым или обобщенным решением задачи (1)–(5) называется вектор-функция  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) \in V$ , удовлетворяющая граничному условию (5), для которой  $\forall \mathbf{v}(\mathbf{x}) \in V_0$  выполняется интегральное тождество

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = 0. \quad (6)$$

Здесь:  $V$  — соответствующее функциональное пространство, зависящее от свойств гладкости входных данных задачи;  $V_0$  — подпространство  $V$ , состоящее из функций  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ , удовлетворяющих однородному главному граничному условию (5), то есть  $\mathbf{v} = 0$  для  $\mathbf{x} \in \Gamma$ ;

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = a_{\Omega}(\mathbf{v}, \mathbf{u}) + a_{\Gamma^s}(\mathbf{v}, \mathbf{u}), \quad a_{\Omega}(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mathbf{S}^*(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{u}) d\Omega, \quad a_{\Gamma^s}(\mathbf{v}, \mathbf{u}) = \int_{\Gamma^s} \mathbf{S}^*(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{S}^s(\mathbf{u}) d\Gamma. \quad (7)$$

Соотношения (6), (7) имеют энергетический и вариационный смысл. Так, если считать  $\mathbf{v} = \delta \mathbf{u}$  вариациями истинного поля перемещений, то формуле (6) можно придать смысл вариационного принципа Лагранжа:  $\delta \Pi(\mathbf{u}) = 0$ , где  $\Pi(\mathbf{u}) = a(\mathbf{u}, \mathbf{u})/2$  — функционал потенциальной энергии. Видно, что с учетом (7) этот функционал включает как обычную для упругого тела объемную энергию  $\Pi_{\Omega}(\mathbf{u}) = a_{\Omega}(\mathbf{u}, \mathbf{u})/2$ , так и поверхностную энергию  $\Pi_{\Gamma^s}(\mathbf{u}) = a_{\Gamma^s}(\mathbf{u}, \mathbf{u})/2$ , характерную для задач с напряжениями на наноразмерных интерфейсных границах.

Более удобная форма слабой постановки задачи получается после применения процедуры снятия неоднородных граничных условий. Представим решение  $\mathbf{u}$  в виде суммы двух вектор-функций:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_d + \mathbf{u}_b, \quad (8)$$

где  $\mathbf{u}_d \in V_0$  — неизвестная функция, удовлетворяющая однородным граничным условиям, а  $\mathbf{u}_b \in V$  — специально подобранная под неоднородные граничные условия (5) функция, то есть

$$\mathbf{u}_d = 0, \quad \mathbf{u}_b = \mathbf{L}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}_0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma. \quad (9)$$

Используя (8), можно представить слабую формулировку задачи в другом виде — относительно функции  $\mathbf{u}_d \in V_0$ :

$$a(\mathbf{v}, \mathbf{u}_d) = L(\mathbf{v}), \quad L(\mathbf{v}) = -a(\mathbf{v}, \mathbf{u}_b). \quad (10)$$

Отметим, что выше рассматривались двухфазные композиты. Однако модель Гуртина–Мурдоха описывает и задачи гомогенизации для нанопористых композитов с поверхностными напряжениями на границах пор, если принять упругие жесткости материала  $\Omega^{(2)}$  пренебрежимо малыми.

Приближенное решение  $\mathbf{u}_h \approx \mathbf{u}$  задачи (6) или (10) будем искать методом конечных элементов (МКЭ). Пусть  $\Omega_h$  — область, занимаемая конечно-элементной сеткой из объемных элементов,  $\Omega_h \approx \Omega$ ,  $\Omega_h = \Omega_h^{(1)} \cup \Omega_h^{(2)}$ ,  $\Omega_h^{(j)} \approx \Omega^{(j)}$ ,  $\Omega_h = \cup_k \Omega_{ek}$ , где  $\Omega_{ek}$  — отдельный объемный конечный элемент с номером  $k$ . Пусть также  $\Gamma_h^s$  — сетка из поверхностных конечных элементов, согласующаяся с объемной сеткой  $\Omega_h$ ,  $\Gamma_h^s = \partial \Omega_h^{(1)} \cap \partial \Omega_h^{(2)}$ ,  $\Gamma_h^s = \cup_m \Gamma_{em}^s$ , при этом  $\Gamma_{em}^s$  — отдельный поверхностный конечный элемент с номером  $m$ , являющийся гранями соответствующих объемных элементов  $\Omega_{ek}$ , выходящих на поверхности раздела фаз ( $\Gamma_h^s \approx \Gamma^s$ ).

Воспользуемся лагранжевыми или серендиповыми конечными элементами со степенями свободы узловых перемещений. Важно, что в силу структуры полей поверхностных напряжений и деформаций (3), (4) в качестве элементов  $\Gamma_{em}^s$  можно применять оболочечные элементы с опциями мембранных напряжений и только со степенями свободы узловых перемещений. У этих элементов толщина должна быть такой, чтобы поверхностные модули  $\mathbf{c}^s$  из (4) имели значения, равные произведению этой толщины и специально заданных объемных модулей.

Прибегнув к стандартному конечно-элементному подходу, приближенное решение  $\mathbf{u}_h$  можно записать как

$$\mathbf{u}_h = \mathbf{N}^*(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{U}, \quad (11)$$

где  $\mathbf{N}^*(\mathbf{x})$  — матрица базисных функций (функций формы),  $\mathbf{U}$  — вектор узловых перемещений.

Подставив (11) и аналогичное выражение для проекционной функции  $\mathbf{v}$  в слабую постановку задачи (6), записанную для области  $\Omega_h$ , придем к системе конечно-элементных уравнений равновесия

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (12)$$

где

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_{\Omega} + \mathbf{K}_{\Gamma}, \quad \mathbf{K}_{\Omega} = \int_{\Omega_h} \mathbf{B}^* \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{B} d\Omega, \quad \mathbf{K}_{\Gamma} = \int_{\Gamma_h^s} \mathbf{B}^{s*} \cdot \mathbf{c}^s \cdot \mathbf{B}^s d\Gamma, \quad \mathbf{B} = \mathbf{L}^*(\nabla) \cdot \mathbf{N}^*, \quad \mathbf{B}^s = \mathbf{L}^*(\nabla^s) \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{N}^*. \quad (13)$$

Заметим, что среди компонент вектора  $\mathbf{U}$  известны перемещения для узлов, находящихся на границе  $\Gamma_h$ , и, в соответствии с разложением (8), справедливы следующие соотношения:

$$\mathbf{u}_h = \mathbf{u}_{dh} + \mathbf{u}_{bh}, \quad \mathbf{u}_d \approx \mathbf{u}_{dh}, \quad \mathbf{u}_{dh} = \mathbf{N}_d^* \cdot \mathbf{U}_d, \quad \mathbf{u}_b \approx \mathbf{u}_{bh}, \quad \mathbf{u}_{bh} = \mathbf{N}_b^* \cdot \mathbf{U}_b, \\ \mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{dd} & \mathbf{K}_{db} \\ \mathbf{K}_{db}^* & \mathbf{K}_{bb} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{Bmatrix} \mathbf{U}_d \\ \mathbf{U}_b \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{N} = \begin{Bmatrix} \mathbf{N}_d \\ \mathbf{N}_b \end{Bmatrix}, \quad (14)$$

где  $\mathbf{U}_b$  — вектор заданных узловых перемещений. Используя эти представления, из (12) легко получить редуцированную систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных перемещений  $\mathbf{U}_d$ :

$$\mathbf{K}_{dd} \cdot \mathbf{U}_d = \mathbf{F}_d, \quad \mathbf{F}_d = -\mathbf{K}_{db} \cdot \mathbf{U}_b. \quad (15)$$

Таким образом, задачи гомогенизации для упругих нанопористых композитов с поверхностными напряжениями на границах пор можно решать с помощью обычных конечно-элементных технологий. Результирующая система уравнений (15) с учетом (13), (14) отличается от аналогичных уравнений для тел обычных размеров только матрицей  $\mathbf{K}_\Gamma$ , отражающей наличие поверхностных напряжений на границах пор. Поэтому для моделирования нанопористых композитов подходят различные конечно-элементные пакеты, имеющие объемные и оболочечные (точнее, мембранные) элементы.

Как следует из теории метода эффективных модулей, для определения полного набора жесткостных коэффициентов  $c_{\alpha\zeta}^{\text{eff}}$  ( $\alpha, \zeta = 1, 2, \dots, 6$ ) упругого композитного тела с интерфейсными границами в случае анизотропии общего вида необходимо решить шесть ( $\zeta = 1, 2, \dots, 6$ ) задач (1)–(5), полагая в (5)  $\mathbf{S}_0 = \varepsilon_0 \mathbf{h}_\zeta$ , где  $\varepsilon_0 = \text{const}$  (здесь  $\mathbf{h}_\zeta$  — вектор из 6-мерного базиса для компонент тензоров деформаций;  $\mathbf{h}_j = \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j$  ( $j = 1, 2, 3$ );  $\mathbf{h}_4 = (\mathbf{e}_2 \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_2)/2$ ;  $\mathbf{h}_5 = (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_1)/2$ ;  $\mathbf{h}_6 = (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1)/2$ ;  $\mathbf{e}_j$  — орты декартовой системы координат).

В результате решения каждой из шести задач (1)–(5) и вычисления осредненных напряжений  $\langle T_\alpha \rangle$  находится одна из соответствующих строк матрицы эффективных жесткостей  $c_{\alpha\zeta}^{\text{eff}}$ :

$$\mathbf{S}_0 = \varepsilon_0 \mathbf{h}_\zeta, \quad (\zeta = 1, 2, \dots, 6) \Rightarrow c_{\alpha\zeta}^{\text{eff}} = \langle T_\alpha \rangle / \varepsilon_0 \quad (\alpha = 1, 2, \dots, 6). \quad (16)$$

Итак, из энергетического смысла слабой постановки (6), (7) задачи для композитного тела с интерфейсными границами следует, что при вычислении осредненных напряжений надо учитывать не только напряжения в объеме тела  $\Omega$ , но и на межфазных границах  $\Gamma^s$  [1, 7, 8, 14, 19–21]:

$$\langle (\dots) \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \left( \int_{\Omega} (\dots) d\Omega + \int_{\Gamma^s} (\dots) d\Gamma \right). \quad (17)$$

При определенных классах анизотропии материалов исходных фаз, значениях поверхностных модулей и видах геометрий представительных объемов эффективная среда может иметь также вполне конкретный тип анизотропии. Для вычисления эффективных констант такого композита зачастую решается не шесть задач (1)–(5), (16), а меньшее их число. Например, для пористого изотропного материала с изотропными поверхностными модулями упругости при случайно распределенной пористости следует ожидать, что гомогенизированный материал также будет изотропным, и тогда достаточно решить только одну (при  $\zeta = 1$ ) задачу (1)–(5), (16). Это даст коэффициенты  $c_{11}^{\text{eff}} = \langle T_1 \rangle / \varepsilon_0 = \langle \sigma_{11} \rangle / \varepsilon_0$ ,  $c_{12}^{\text{eff}} = \langle T_2 \rangle / \varepsilon_0 = \langle \sigma_{22} \rangle / \varepsilon_0$  и позволит отыскать эффективные модуль Юнга  $E^{\text{eff}} = (c_{11}^{\text{eff}} + 2c_{12}^{\text{eff}})(c_{11}^{\text{eff}} - c_{12}^{\text{eff}}) / (c_{11}^{\text{eff}} + c_{12}^{\text{eff}})$  и коэффициент Пуассона  $\nu^{\text{eff}} = c_{12}^{\text{eff}} / (c_{11}^{\text{eff}} + c_{12}^{\text{eff}})$ . В этой задаче получится:  $c_{12}^{\text{eff}} \approx c_{13}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{33} \rangle / \varepsilon_0$ ,  $c_{14}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{23} \rangle / \varepsilon_0 \approx 0$ ,  $c_{15}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{13} \rangle / \varepsilon_0 \approx 0$ ,  $c_{16}^{\text{eff}} = \langle \sigma_{12} \rangle / \varepsilon_0 \approx 0$ . Решения остальных задач (1)–(5), (16) (при  $\zeta = 2, 3, 4, 5, 6$ ) дадут модули  $c_{\alpha\zeta}^{\text{eff}}$  изотропного материала, то есть установленные коэффициенты могут быть выражены в пределах погрешности по соответствующим формулам через найденные из задачи при  $\zeta = 1$  значения  $E^{\text{eff}}$  и  $\nu^{\text{eff}}$ .

Для материала гексагональной сингонии структуры матриц коэффициентов жесткости  $c_{\alpha\zeta}$  и податливостей  $s_{\alpha\zeta}$  имеют вид:

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = \mathbf{c}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/E_1 & -\nu_{12}/E_1 & -\nu_{13}/E_1 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{12}/E_1 & 1/E_1 & -\nu_{13}/E_1 & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{31}/E_3 & -\nu_{31}/E_3 & 1/E_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/G_{13} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{13} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/G_{12} \end{bmatrix}, \quad (18)$$

где  $c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2$ ,  $s_{\alpha\zeta} = s_{\zeta\alpha}$ ,  $E_i$  — модули Юнга,  $\nu_{ij}$  — коэффициенты Пуассона,  $G_{ij}$  — модули сдвига. Как видно из (18), обсуждаемый материал характеризуется пятью упругими жесткостями  $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{13}$ ,  $c_{33}$ ,  $c_{44}$  или пятью другими модулями, например,  $E_1$ ,  $E_3$ ,  $\nu_{12}$ ,  $\nu_{13}$ ,  $G_{13}$ .

Будем считать, что модели представительных объемов не имеют ярко выраженной геометрической анизотропии, матрица поверхностных модулей наследует структуру материала гексагональной сингонии (18), и поэтому результирующий гомогенный материал также принадлежит к классу анизотропных материалов гексагональной сингонии. Тогда для полного набора его эффективных модулей жесткости достаточно решить три задачи (1)–(5) при соответствующих граничных условиях в (16):

$$\text{I. } \mathbf{S}_0 = \varepsilon_0 \mathbf{h}_1 \Rightarrow c_{1j}^{\text{eff}} = \langle T_j \rangle / \varepsilon_0 = \langle \sigma_{jj} \rangle / \varepsilon_0 \quad (j = 1, 2, 3), \quad (19)$$

$$\text{II. } \mathbf{S}_0 = \varepsilon_0 \mathbf{h}_3 \Rightarrow c_{3j}^{\text{eff}} = c_{j3}^{\text{eff}} = \langle T_j \rangle / \varepsilon_0 = \langle \sigma_{jj} \rangle / \varepsilon_0 \quad (j = 1, 2, 3), \quad (20)$$

$$\text{III. } \mathbf{S}_0 = \varepsilon_0 \mathbf{h}_4 \Rightarrow c_{44}^{\text{eff}} = \langle T_4 \rangle / \varepsilon_0 = \langle \sigma_{23} \rangle / \varepsilon_0, \quad (21)$$

причем другие (при  $\zeta = 2, 5, 6$ ) задачи (1)–(5), (16) могут рассматриваться как проверочные, для того чтобы убедиться, действительно ли получаемый композит имеет эффективные свойства материала гексагональной сингонии.

### 3. Конечно-элементное моделирование представительного объема со случайной пористостью

Реализация представленного подхода была выполнена в программном комплексе ANSYS. Представительный объем  $\Omega$  имел форму куба со стороной  $L$  и равномерно разбивался на меньшие одинаковые кубики — упругие 8-узловые гексаэдральные конечные элементы SOLID185 с анизотропными свойствами. В результате объем  $\Omega$  заключал  $n_v = n_i^3$  конечных объемных элементов, где  $n_i$  — число элементов вдоль одной из осей. В таком двухфазном композите конечные элементы первой фазы наделялись материальными свойствами исходного упругого материала, а для элементов второй фазы — пор, задавались пренебрежимо малые модули жесткости. Для этого выделялись элементы со свойствами пор в соответствии с принимаемой микроструктурой композита. В случае слабо пористого материала нерегулярной стохастической структуры, исходя из задаваемой (в процентах) пористости  $p_a$ , некоторое число конечных элементов случайным образом объявлялось порами:  $n_p = \text{NINT}(n_v p_a / 100)$  (NINT — функция ближайшего целого в программном языке APDL ANSYS). Полученная пористость  $p = 100n_p / n_v$  могла отличаться от ожидаемой пористости  $p_a$ , но обычно — незначительно.

Далее, для автоматизированного размещения мембранных элементов на границах материала с порами применялся следующий алгоритм. Вначале выделялись конечные элементы с материальными свойствами пор. Этот массив элементов по своим внешним границам по команде TSHAP,QUAD покрывался ответными контактными элементами TARGE170. Таким образом, на границы массива элементов со свойствами пор были добавлены 4-узловые контактные элементы (TARGE170 вида QUAD). Затем находящиеся на внешней границе  $\Gamma$  представительного объема контактные элементы удалялись, а оставшиеся заменялись на 4-узловые оболочечные элементы SHELL181 с опцией только мембранных напряжений. Для оболочечных элементов требовалось еще обеспечение типа анизотропии, согласующегося с анизотропией объемных конечных элементов. В случае материала гексагональной сингонии данная процедура осуществлялась путем перестановки коэффициентов жесткости по строкам и столбцам, соответствующим осям  $z$  и  $y$ , для оболочечных элементов, расположенных перпендикулярно плоскости изотропии  $Oxy$ . В итоге все грани соприкосновения упругих структурных элементов с порами

оказывались покрытыми мембранными упругими конечными элементами, моделирующими наличие поверхностных напряжений (3), (4) на интерфейсных границах  $\Gamma^s$ .

На следующем этапе для полученного представительного объема решались статические задачи (1)–(5), (16), после чего в постпроцессоре ANSYS вычислялись осредненные напряжения, причем как по объемным, так и по поверхностным элементам. Наконец, по соответствующим формулам, например (19)–(21), через найденные средние напряжения устанавливались эффективные модули жесткости пористого композита с учетом поверхностных эффектов.

Отметим, что из-за выбора пор в описанном выше алгоритме с помощью генератора случайных величин при каждом новом запуске программы они будут располагаться, вообще говоря, в других местах. При этом в силу разницы в расположении пор общая площадь мембран  $\Gamma^s$  может измениться даже при одинаковой пористости, и, следовательно, суммарная жесткость всего объема также будет иной. При малой пористости  $p$  эти эффекты, однако, не будут слишком влиять на расчетные значения эффективных модулей при очередных запусках программы.

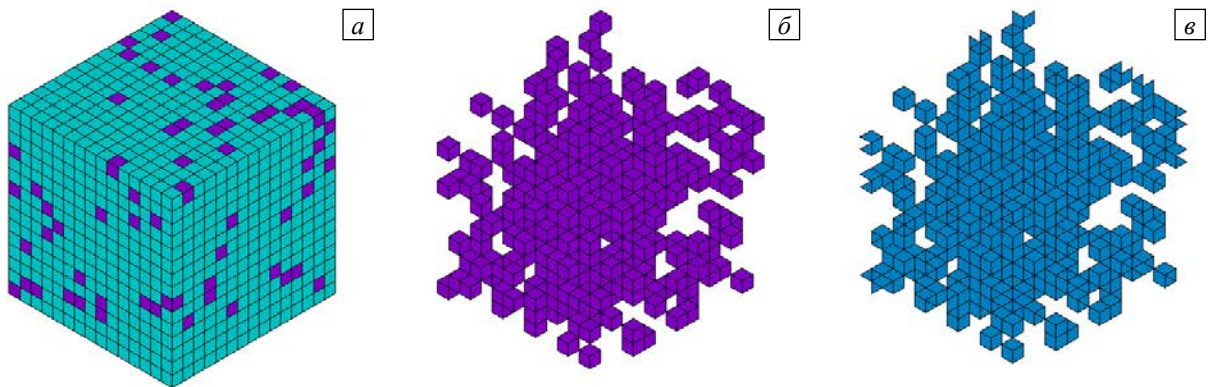


Рис. 1. Вариант представительного объема при  $p \approx 10\%$ ,  $n_i = 15$ : весь объем (а), поры (б), интерфейсные границы (в)

На рисунке 1 показан представительный объем и его элементы при одном из проходов алгоритма для пористости  $p = 10,0148\%$  при  $n_i = 15$  и  $p_a = 10\%$ , когда отношение площадей пор к общей площади объема составило:  $r(S_p) = |\Gamma^s|/|\Gamma| = 1,241$ .

Интересно, что при одном и том же размере  $L$  объема  $\Omega$  в зависимости от рассматриваемого числа элементов по осям —  $n_i$ , меняется размер  $l = L/n_i$  конечных элементов, а следовательно, и размер отдельных пор. Поэтому при фиксированном проценте пористости  $p$  с увеличением  $n_i$  размер пор уменьшится, но их суммарное количество  $n_p$  увеличится, и в итоге суммарная площадь границы  $\Gamma^s$  вырастет.

Показанным на рисунке 2 вариантам реализации алгоритма отвечают, соответственно, следующие значения отношения площадей пор к общей площади объема  $r(S_p)$ : 0,795 (а); 1,695 (б); 2,620 (в).

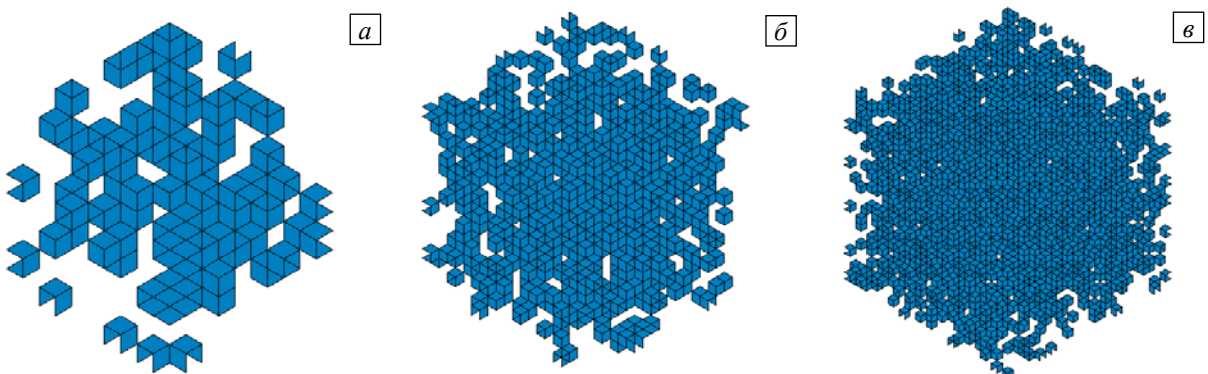


Рис. 2. Вид интерфейсных границ при  $p \approx 10\%$  и различном числе  $n_i$  элементов по осям: 10 (а); 20 (б); 30 (в)

#### 4. Численные результаты для нанопористого композита гексагональной кристаллической системы

В качестве примера рассмотрим задачу нахождения эффективных констант нанопористого бериллия. Как известно, бериллий является анизотропным материалом гексагональной сингонии. При расчетах примем следующие значения объемных материальных модулей бериллия с нулевой пористостью при температуре  $T = 27^\circ\text{C}$  [24]:  $c_{11} = 29,2 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ ;  $c_{12} = 2,7 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ ;  $c_{13} = 1,4 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ ;  $c_{33} = 33,6 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ ;  $c_{44} = 16,3 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ . При этом для пор материалы константы (отмеченные верхним индексом  $p$ ) выберем такими:  $c_{\alpha\alpha}^p = \kappa c_{\alpha\alpha}$ ;  $\kappa = 1 \cdot 10^{-10}$ . Поскольку поверхностные напряжения моделируются конечными элементами упругих мембран, то для них зададим толщину  $h^s$ , а модули жесткости примем пропорциональными модулям жесткости материала композита:  $\tilde{c}_{\alpha\alpha}^s = k^s c_{\alpha\alpha}$ , где  $k^s$  — безразмерный множитель. При таком подходе формулы (3), (4) выполняются при поверхностных модулях  $c_{\alpha\alpha}^s = h^s \tilde{c}_{\alpha\alpha}^s = h^s k^s c_{\alpha\alpha}$ , то есть в данном случае важны не величины  $h^s$  и  $k^s$  по отдельности, а их произведение  $h^s k^s$ . В связи с этим далее толщину  $h^s$  зафиксируем:  $h^s = 1 \text{ м}$ , а при анализе влияния поверхностных напряжений будем варьировать только коэффициент  $k^s$  в диапазоне от  $10^{-4}$  до 1.

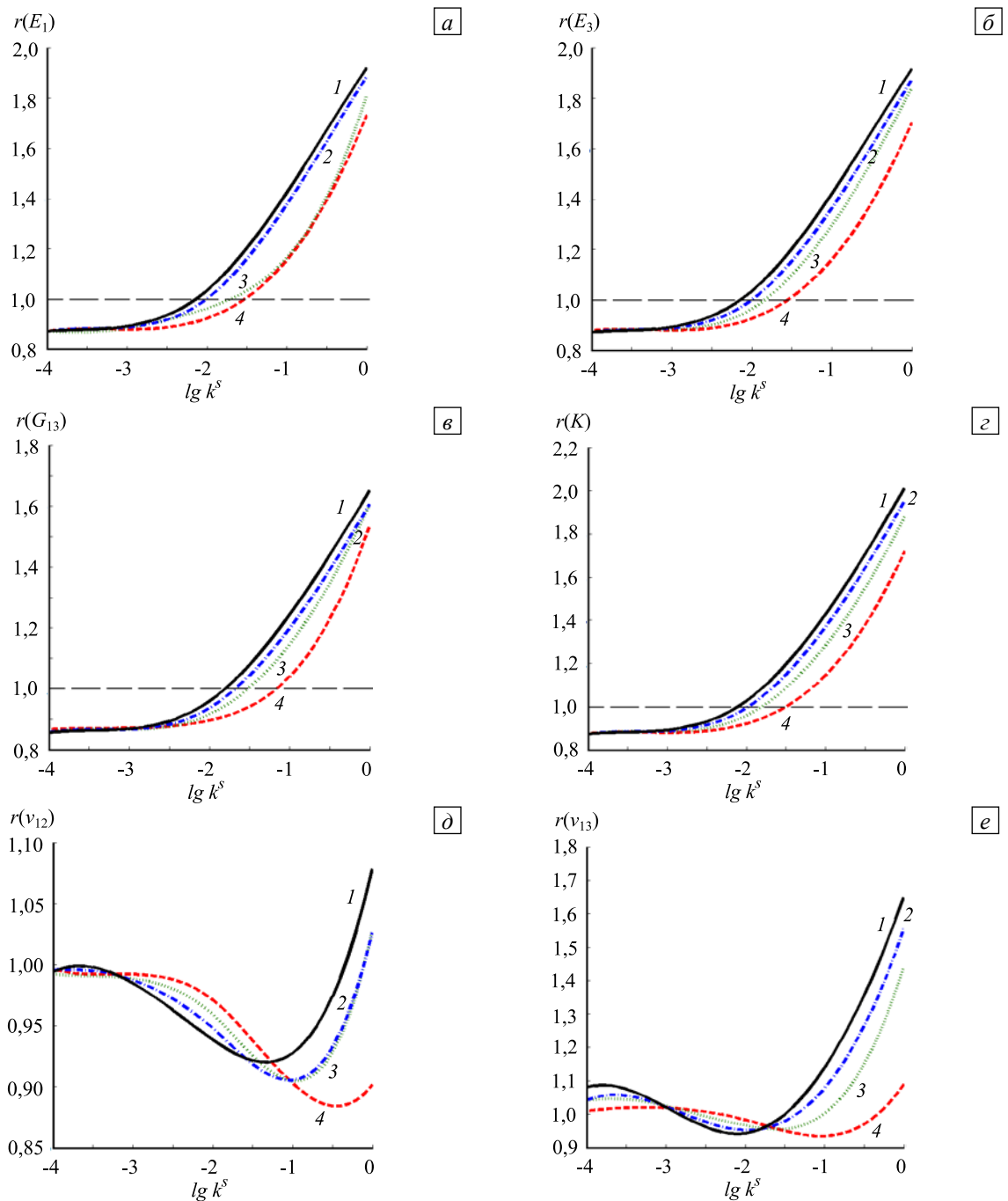
Как отмечалось в разделе 2, для отыскания эффективных модулей материала гексагональной сингонии достаточно решить три краевые задачи (1)–(5) с граничными условиями (19)–(21) в (16), что позволит вычислить все пять основных материальных упругих констант пористого бериллия:  $c_{11}^{\text{eff}}$ ,  $c_{12}^{\text{eff}}$ ,  $c_{13}^{\text{eff}}$ ,  $c_{33}^{\text{eff}}$ ,  $c_{44}^{\text{eff}} = G_{13}^{\text{eff}}$ . По этим значениям можно определить другие важные для практических применений характеристики композита: упругие податливости  $s_{11}^{\text{eff}} = [c_{11}^{\text{eff}} c_{33}^{\text{eff}} - (c_{13}^{\text{eff}})^2] / \Delta_c^{\text{eff}}$ ,  $s_{12}^{\text{eff}} = -[c_{12}^{\text{eff}} c_{33}^{\text{eff}} - (c_{13}^{\text{eff}})^2] / \Delta_c^{\text{eff}}$ ,  $s_{13}^{\text{eff}} = -c_{13}^{\text{eff}} / D_c^{\text{eff}}$ ,  $s_{33}^{\text{eff}} = (c_{11}^{\text{eff}} + c_{12}^{\text{eff}}) / D_c^{\text{eff}}$ ,  $\Delta_c^{\text{eff}} = (c_{11}^{\text{eff}} - c_{12}^{\text{eff}}) D_c^{\text{eff}}$ ,  $D_c^{\text{eff}} = c_{33}^{\text{eff}} (c_{11}^{\text{eff}} + c_{12}^{\text{eff}}) - 2(c_{13}^{\text{eff}})^2$ ,  $s_{44}^{\text{eff}} = (c_{44}^{\text{eff}})^{-1}$ ; модули Юнга  $E_1^{\text{eff}} = 1 / s_{11}^{\text{eff}}$ ,  $E_3^{\text{eff}} = 1 / s_{33}^{\text{eff}}$ ; коэффициенты Пуассона  $\nu_{12}^{\text{eff}} = -s_{12}^{\text{eff}} / s_{11}^{\text{eff}}$ ,  $\nu_{13}^{\text{eff}} = -s_{13}^{\text{eff}} / s_{11}^{\text{eff}}$ ; объемный модуль  $K^{\text{eff}} = (2c_{11}^{\text{eff}} + 2c_{12}^{\text{eff}} + 4c_{13}^{\text{eff}} + c_{33}^{\text{eff}}) / 9$ . При приведенных величинах упругих жесткостей модули Юнга, коэффициенты Пуассона и объемный модуль бериллия имеют следующие значения:  $E_1 = 28,90 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ ;  $E_3 = 33,48 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ ;  $\nu_{12} = 0,09$ ;  $\nu_{13} = 0,04$ ;  $K = 11,44 \cdot 10^{10} \text{ Н/м}^2$ . Как видно, для бериллия характерны достаточно малые значения коэффициентов Пуассона.

На рисунке 3 показаны зависимости относительных — отнесенных к соответствующим значениям модулей при нулевой пористости — величин эффективных модулей бериллия от коэффициента  $k^s$  в логарифмической шкале при пористости  $p \approx 10\%$  и различном числе  $n_i$  элементов по осям представительного объема. Так,  $r(E_1) = E_1^{\text{eff}} / E_1$ , где  $E_1^{\text{eff}}$  — эффективный модуль Юнга нанопористого бериллия с учетом поверхностных напряжений, а  $E_1$  — значение модуля Юнга обычного материала бериллия. Другие относительные характеристики  $r(\dots)$  находятся по аналогии.

Как видно, поведение эффективных модулей  $E_1^{\text{eff}}$ ,  $E_3^{\text{eff}}$ ,  $G_{13}^{\text{eff}}$  и  $K^{\text{eff}}$  в зависимости от значений поверхностных модулей качественно совпадает, но при увеличении  $k^s$  модули Юнга и объемный модуль растут несколько быстрее, чем модуль сдвига, а наибольшую скорость имеет объемный модуль  $K^{\text{eff}}$ . При  $k^s \leq 10^{-3}$  поверхностные эффекты незначительно влияют на характер изменения модулей жесткости. Их рост наблюдается приблизительно со значения  $k^s \approx 10^{-3}$ . При этом в условиях фиксированной пористости  $p \approx 10\%$  с наращиванием количества элементов  $n_i = 10, 20, 30, 40$  размеры пор уменьшаются, но их число и суммарная площадь увеличиваются. В результате поверхностные эффекты проявляются в большей степени, и модули жесткости возрастают (кривые 1 располагаются выше, чем кривые 2; кривые 2 — выше, чем 3; кривые 3 — выше, чем 4). Следует отметить, что при больших значениях поверхностных модулей жесткости общие эффективные модули жесткости всего пористого наноматериала могут превосходить по величине соответствующие модули сплошного материала. На рисунках 3а–в этот эффект наблюдается при превышении относительными величинами модулей единичного значения.

Между тем рисунок 3д, е показывает, что поведение коэффициентов Пуассона  $\nu_{12}^{\text{eff}}$  и  $\nu_{13}^{\text{eff}}$  бериллия при возрастании поверхностных модулей не имеет монотонности. При малых коэффициентах пропорциональности поверхностных модулей проявляется или небольшой рост, или убывание значений коэффициентов Пуассона, а их существенный рост имеется только при больших значениях поверхностных модулей. Такое поведение коэффициентов Пуассона не характерно для других материалов, например, для кремния [19], коэффициент Пуассона которого при больших  $k^s$  убывает. Необычное поведение коэффициентов Пуассона нанопористого бериллия можно объяснить тем, что исходные значения  $\nu_{12}$  и  $\nu_{13}$  были крайне малыми. Поэтому изменения больших значений модулей жесткости суммарно могут давать различные эффекты для коэффициентов Пуассона, которые в итоге оказываются тем не менее достаточно



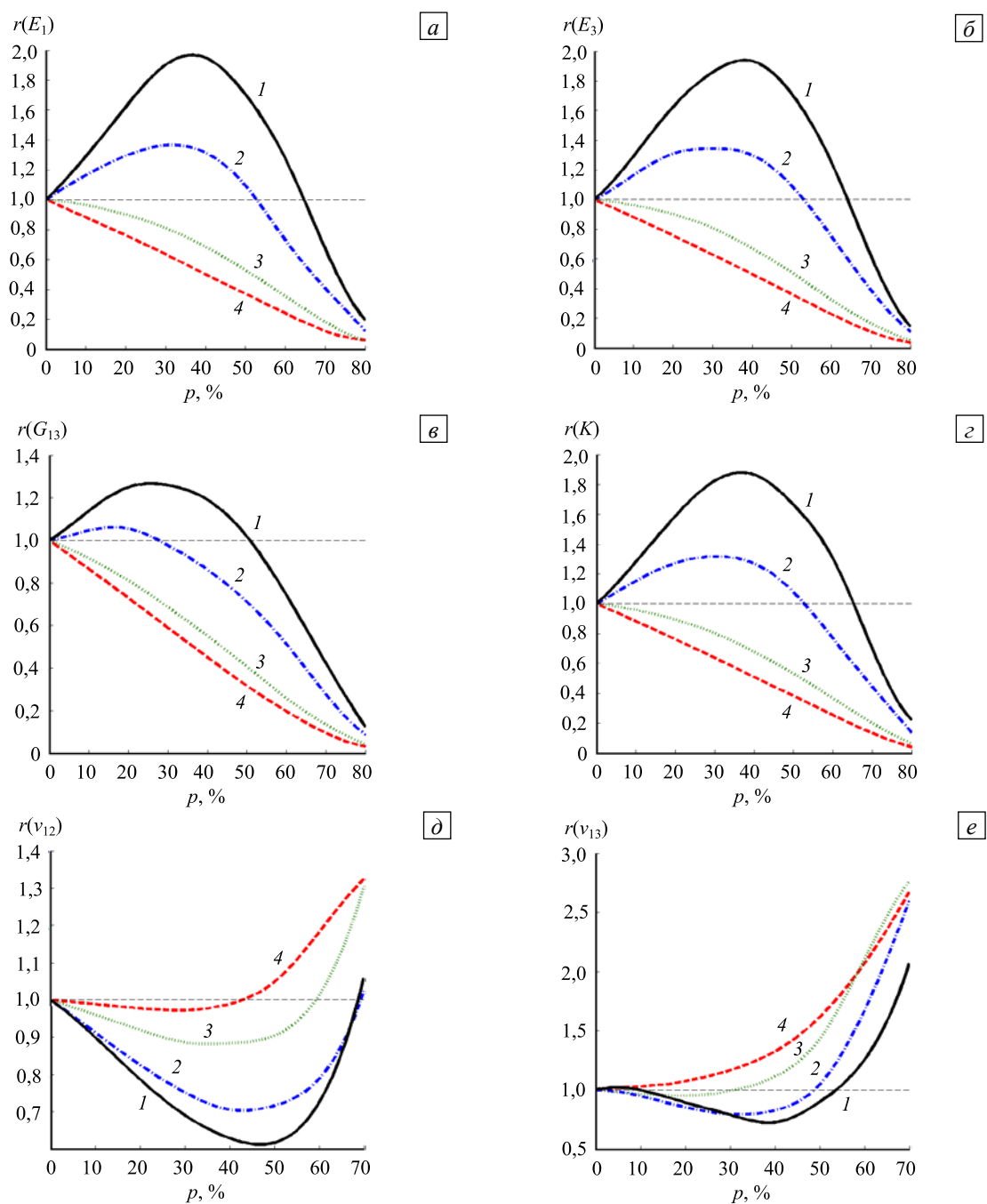


**Рис. 3.** Зависимости от поверхностных модулей относительных значений следующих эффективных величин: модулей Юнга  $r(E_1)$  (а) и  $r(E_3)$  (б), модуля сдвига  $r(G_{13})$  (в), объемного модуля  $r(K)$  (г), коэффициентов Пуассона  $r(\nu_{12})$  (д) и  $r(\nu_{13})$  (е); кривые 1 отвечают  $n_i = 40$ , 2 –  $n_i = 30$ , 3 –  $n_i = 20$ , 4 –  $n_i = 10$

малыми (на фрагментах 3д, е приведены коэффициенты Пуассона, отнесенные к малым исходным коэффициентам Пуассона бериллия!). Кроме того, погрешности вычислений малых значений коэффициентов Пуассона, очевидно, больше погрешностей определения модулей жесткости.

Для выяснения влияния поверхностного эффекта на эффективные модули в зависимости от пористости были проведены расчеты относительных эффективных модулей при фиксированном числе элементов  $n_i = 20$ , но при разном значении  $p$  и различных, но не слишком больших множителях  $k^s$ . Результаты этих расчетов представлены на рисунке 4.

Графики свидетельствуют, что при относительно малых значениях множителя  $k^s$  (кривые 3 и 4) поверхностные эффекты достаточно слабо влияют на модули жесткости. Однако при любой пористости поверхностные напряжения увеличивают эффективные жесткости пористого материала. Более того, как уже отмечалось ранее, возможны случаи, когда нанопористый материал будет иметь большую жесткость, чем аналогичный сплошной материал. Такая ситуация в случае  $k^s = 0,1$  наблюдается при  $p \leq 67\%$



**Рис. 4.** Зависимости от пористости относительных значений следующих эффективных величин: модулей Юнга  $r(E_1)$  (а) и  $r(E_3)$  (б), модуля сдвига  $r(G_{13})$  (в), объемного модуля  $r(K)$  (г), коэффициентов Пуассона  $r(v_{12})$  (д) и  $r(v_{13})$  (е); кривые 1 отвечают  $k^s = 0,1$ , 2 –  $k^s = 0,05$ , 3 –  $k^s = 0,01$ , 4 –  $k^s = 0,001$

для модулей Юнга и объемного модуля, и при  $p \leq 52\%$  — для модуля сдвига  $G_{13}^{\text{eff}}$ . При  $k^s = 0,05$ , что в большей мере соответствует экспериментальным данным для других материалов, эффективные модули Юнга и объемный модуль превосходят соответствующие модули сплошного материала при  $p \leq 55\%$ , а модуль сдвига — при  $p \leq 28\%$ .

Отметим, что пористость и поверхностные эффекты оказывают противоположное влияние на эффективные жесткости: простой рост пористости приводит к уменьшению модулей жесткости, а поверхностные эффекты увеличивают жесткости. Для нанопористых материалов увеличение пористости влечет за собой и увеличение площади границ пор с поверхностными напряжениями. Поэтому с ростом пористости у наноматериала модули жесткости могут и возрастать. Например, при больших значениях поверхностных модулей увеличение пористости при малых и средних значениях  $p$  ( $p \leq 67\%$  при  $k^s = 0,1$  и  $p \leq 55\%$  при  $k^s = 0,05$ ) приводит к росту эффективных модулей Юнга, а при дальнейшем увеличении  $p$  эффективные модули Юнга начинают достаточно быстро убывать.

Необходимо подчеркнуть, что представленные результаты для высокопористых материалов нуждаются в корректировке. Причина состоит в использовании модели представительного объема со случайной пористостью. Действительно, принятая модель легко строится, но не поддерживает связность элементов первой фазы и не отражает структуры связности элементов второй фазы (закрытые или открытые поры). Другие методы, принимающие во внимание связность каркаса, состоящего из элементов первой фазы, или кластерность элементов второй фазы, описаны в [25, 26], но в настоящей работе не применялись. Анализ влияния различных структур представительных объемов на эффективные модули нанопористых материалов, а также уточненные расчеты для высокопористых материалов планируется выполнить при продолжении исследований.

## 5. Заключение

Итак, в работе рассмотрены модели гомогенизации двухфазного упругого композита с поверхностными напряжениями на межфазных границах, отражающие размерные эффекты в наноструктурированных композитах. Представленный подход переносится на случай пористых материалов, когда вторая фаза состоит из набора пор, моделируемых упругими материалами с пренебрежимо малыми модулями жесткости. Данная модель применена для расчета эффективных модулей нанопористого бериллия гексагональной сингонии. Решения задач гомогенизации найдены методом конечных элементов в программном комплексе ANSYS для кубического представительного объема с равномерным разбиением на гексаэдральные элементы и случайной пористостью. Описан алгоритм автоматизированного создания мембранных поверхностных конечных элементов на межфазных границах. При этом мембранные поверхностные элементы также автоматически наделялись типом анизотропии, получаемой редукцией исходного класса анизотропии объемных элементов на поверхности мембранных конечных элементов. Однако данный подход разработан только для поверхностных конечных элементов, параллельных осям декартовой системы координат.

В результате проведенных вычислительных экспериментов обнаружены тенденции, аналогичные отмеченным в работах [1, 14, 15, 19–21]. Если сравнить два подобных тела, одно из которых обычных размеров, а другое с наноразмерами, то за счет поверхностных напряжений у наноразмерного упругого тела эффективные жесткости будут больше, чем у тела с обычными размерами. Кроме того, для пористого тела обычных размеров эффективные упругие жесткости убывают с ростом пористости. Между тем эффективные жесткости пористого нанокompозитного тела при одной и той же пористости могут как уменьшаться, так и увеличиваться, все зависит от величин поверхностных модулей и размеров, а также количества пор. Этот эффект связан прежде всего с тем, что на размеры границ пор с поверхностными напряжениями влияет не только общая пористость, но и конфигурация, размеры и число пор.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 15-19-10008).

## Литература

1. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects // *Acta Mech.* – 2016. – Vol. 227, no. 1. – P. 29-42. DOI
2. Hamilton J.C., Wolfier W.G. Theories of surface elasticity for nanoscale objects // *Surf. Sci.* – 2009. – Vol. 603, no. 9. – P. 1284-1291. DOI
3. Wang J., Huang Z., Duan H., Yu S., Feng X., Wang G., Zhang W., Wang T. Surface stress effect in mechanics of nanostructured materials // *Acta Mech. Solida Sin.* – 2011. – Vol. 24, no. 1. – P. 52-82. DOI
4. Wang K.F., Wang B.L., Kitamura T. A review on the application of modified continuum models in modeling and simulation of nanostructures // *Acta Mech. Sinica.* – 2016. – Vol. 32, no. 1. – P. 83-100. DOI
5. Gurtin M.E., Murdoch A.I. A continuum theory of elastic material surfaces // *Arch. Ration Mech. An.* – 1975. – Vol. 57, no. 4. – P. 291-323. DOI
6. Chatzigeorgiou G., Javili A., Steinmann P. Multiscale modelling for composites with energetic interfaces at the micro- or nanoscale // *Math. Mech. Solids.* – 2015. – Vol. 20, no. 9. – P. 1130-1145. DOI
7. Duan H.L., Wang J., Huang Z.P., Karihaloo B.L. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2005. – Vol. 53, no. 7. – P. 1574-1596. DOI
8. Javili A., Steinmann P., Mosler J. Micro-to-macro transition accounting for general imperfect interfaces // *Comput. Method. Appl. M.* – 2017. – Vol. 317. – P. 274-317. DOI
9. Le Quang H., He Q.-C. Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces // *Mech. Mater.* – 2008. – Vol. 40, no. 10. – P. 865-884. DOI
10. Brisard S., Dormieux L., Kondo D. Hashin-Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects // *Comp. Mater. Sci.* – 2010. – Vol. 48, no. 3. – P. 589-596. DOI
11. Brisard S., Dormieux L., Kondo D. Hashin-Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects // *Comp. Mater. Sci.* – 2010. – Vol. 50, no. 2. – P. 403-410. DOI
12. Chen T., Dvorak G.J., Yu C.C. Solids containing spherical nano-inclusions with interface stresses: Effective properties and thermal-mechanical connections // *Int. J. Solids Struct.* – 2007. – Vol. 44, no. 3-4. – P. 941-955. DOI

13. Duan H.L., Wang J., Huang Z.P., Karihaloo B.L. Eshelby formalism for nano-inhomogeneities // *P. Roy. Soc. Lond. A.* – 2005. – Vol. 461. – P. 3335-3353. DOI
14. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L., Huang Z.P. Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification // *Acta Mater.* – 2006. – Vol. 54, no. 11. – P. 2983-2990. DOI
15. Еремеев В.А., Морозов Н.Ф. Об эффективной жесткости нанопористого стержня // *ДАН.* – 2010. – Т. 432, № 4. – С. 473-476. (English version DOI)
16. Jeong J., Cho M., Choi J. Effective mechanical properties of micro/nano-scale porous materials considering surface effects // *Interaction and Multiscale Mechanics.* – 2011. – Vol. 4, no. 2. – P. 107-122. DOI
17. Kushch V.I., Mogilevskaya S.G., Stolarski H.K., Crouch S.L. Elastic interaction of spherical nanoinhomogeneities with Gurtin–Murdoch type interfaces // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2011. – Vol. 59, no. 9. – P. 1702-1716. DOI
18. Nazarenko L., Bargmann S., Stolarski H. Energy-equivalent inhomogeneity approach to analysis of effective properties of nanomaterials with stochastic structure // *Int. J. Solids Struct.* – 2015. – Vol. 59. – P. 183-197. DOI
19. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Finite element modeling and computer design of anisotropic elastic porous composites with surface stresses / *Wave dynamics and mechanics of composites for analysis of microstructured materials and metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials.* – 2017. – Vol. 59. – P. 107-122. DOI
20. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Kornievsky A.S. Modeling of nanostructured porous thermoelastic composites with surface effects // *AIP Conf. Proc.* – 2017. – Vol. 1798. – 020110. DOI
21. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Kornievsky A.S. Finite element modeling of effective properties of nanoporous thermoelastic composites with surface effects // *Coupled Problems 2017 – Proceedings of the VII International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, 12-14 June 2017, Rhodes Island, Greece.* – P. 1140-1151. (URL: <http://congress.cimne.com/coupled2017/frontal/Doc/Ebook2017.pdf>).
22. Tian L., Rajapakse R.K.N.D. Finite element modelling of nanoscale inhomogeneities in an elastic matrix // *Comp. Mater. Sci.* – 2007. – Vol. 41, no. 1. – P. 44-53. DOI
23. Riaz U., Ashraf S.M. Application of finite element method for the design of nanocomposites // *Computational finite element methods in nanotechnology / Ed. by S.M. Musa.* – CRC Press, 2012. – Ch. 7. – P. 241-290.
24. Smith J.F., Arbogast C.L. Elastic constants of single crystal beryllium // *J. Appl. Phys.* – 1960. – Vol. 31. – P. 99-101. DOI
25. Наседкин А.В., Наседкина А.А., Ремизов В.В. Конечно-элементное моделирование пористых термоупругих композитов с учетом микроструктуры // *Вычисл. мех. сплош. сред.* – 2014. – Т. 7, № 1. – С. 100-109. DOI
26. Kurbatova N.V., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganeyan P.A., Skaliukh A.S., Soloviev A.N. Models of active bulk composites and new opportunities of ACELAN finite element package / *Wave dynamics and mechanics of composites for analysis of microstructured materials and metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials.* – 2017. – Vol. 59. – P. 133-158. DOI

## References

1. Eremeyev V.A. On effective properties of materials at the nano- and microscales considering surface effects. *Acta Mech.*, 2016, vol. 227, no. 1, pp. 29-42. DOI
2. Hamilton J.C., Wolfer W.G. Theories of surface elasticity for nanoscale objects. *Surf. Sci.*, 2009, vol. 603, no. 9, pp. 1284-1291. DOI
3. Wang J., Huang Z., Duan H., Yu S., Feng X., Wang G., Zhang W., Wang T. Surface stress effect in mechanics of nanostructured materials. *Acta Mech. Solida Sin.*, 2011, vol. 24, no. 1, pp. 52–82. DOI
4. Wang K.F., Wang B.L., Kitamura T. A review on the application of modified continuum models in modeling and simulation of nanostructures. *Acta Mech. Sinica*, 2016, vol. 32, no. 1, pp. 83-100. DOI
5. Gurtin M.E., Murdoch A.I. A continuum theory of elastic material surfaces. *Arch. Ration Mech. An.*, 1975, vol. 57, no. 4, pp. 291-323. DOI
6. Chatzigeorgiou G., Javili A., Steinmann P. Multiscale modelling for composites with energetic interfaces at the micro- or nanoscale. *Math. Mech. Solids.*, 2015, vol. 20, no. 9, pp. 1130-1145. DOI
7. Duan H.L., Wang J., Huang Z.P., Karihaloo B.L. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *J. Mech. Phys. Solids*, 2005, vol. 53, no. 7, pp. 1574-1596. DOI
8. Javili A., Steinmann P., Mosler J. Micro-to-macro transition accounting for general imperfect interfaces. *Comput. Method. Appl. M.*, 2017, vol. 317, pp. 274-317. DOI
9. Le Quang H., He Q.-C. Variational principles and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interfaces. *Mech. Mater.*, 2008, vol. 40, no. 10, pp. 865-884. DOI
10. Brisard S., Dormieux L., Kondo D. Hashin–Shtrikman bounds on the bulk modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Comp. Mater. Sci.*, 2010, vol. 48, no. 3, pp. 589-596. DOI
11. Brisard S., Dormieux L., Kondo D. Hashin–Shtrikman bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Comp. Mater. Sci.*, 2010, vol. 50, no. 2, pp. 403-410. DOI
12. Chen T., Dvorak G.J., Yu C.C. Solids containing spherical nano-inclusions with interface stresses: Effective properties and thermal–mechanical connections. *Int. J. Solids Struct.*, 2007, vol. 44, no. 3-4, pp. 941–955. DOI
13. Duan H.L., Wang J., Huang Z.P., Karihaloo B.L. Eshelby formalism for nano-inhomogeneities. *P. Roy. Soc. Lond. A.*, 2005, vol. 461, pp. 3335-3353. DOI
14. Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L., Huang Z.P. Nanoporous materials can be made stiffer than non-porous counterparts by surface modification. *Acta Mater.*, 2006, vol. 54, no. 11, pp. 2983-2990. DOI
15. Eremeyev V.A., Morozov N.F. The effective stiffness of a nanoporous rod. *Doklady Physics*, 2010, vol. 55, no. 6, pp. 279-282. DOI
16. Jeong J., Cho M., Choi J. Effective mechanical properties of micro/nano-scale porous materials considering surface effects. *Interaction and Multiscale Mechanics*, 2011, vol. 4, no. 2, pp. 107-122. DOI

17. Kushch V.I., Mogilevskaya S.G., Stolarski H.K., Crouch S.L. Elastic interaction of spherical nanoinhomogeneities with Gurtin–Murdoch type interfaces. *J. Mech. Phys. Solids*, 2011, vol. 59, no. 9, pp. 1702-1716. DOI
18. Nazarenko L., Bargmann S., Stolarski H. Energy-equivalent inhomogeneity approach to analysis of effective properties of nanomaterials with stochastic structure. *Int. J. Solids Struct.*, 2015, vol. 59, pp. 183-197. DOI
19. Nasedkin A.V., Kornievsky A.S. Finite element modeling and computer design of anisotropic elastic porous composites with surface stresses. *Wave dynamics and mechanics of composites for analysis of microstructured materials and metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials*, 2017, vol. 59, pp. 107-122. DOI
20. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Kornievsky A.S. Modeling of nanostructured porous thermoelastic composites with surface effects. *AIP Conf. Proc.*, 2017, vol. 1798, 020110. DOI
21. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Kornievsky A.S. Finite element modeling of effective properties of nanoporous thermoelastic composites with surface effects. *Coupled Problems 2017 – Proceedings of the VII International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering*, 12-14 June 2017, Rhodes Island, Greece, pp. 1140-1151. (URL: <http://congress.cimne.com/coupled2017/frontal/Doc/Ebook2017.pdf>).
22. Tian L., Rajapakse R.K.N.D. Finite element modelling of nanoscale inhomogeneities in an elastic matrix. *Comp. Mater. Sci.*, 2007, vol. 41, no. 1, pp. 44-53. DOI
23. Riaz U., Ashraf S.M. Application of finite element method for the design of nanocomposites. *Computational finite element methods in nanotechnology*, ed. by S.M. Musa. CRC Press, 2012, ch. 7, pp. 241-290.
24. Smith J.F., Arbogast C.L. Elastic constants of single crystal beryllium. *J. Appl. Phys.*, 1960, vol. 31, pp. 99-101. DOI
25. Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Remizov V.V. Finite element modeling of porous thermoelastic composites with account for their microstructure. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational Continuum Mechanics*, 2014, vol. 7, no. 1, pp. 100-109. DOI
26. Kurbatova N.V., Nadolin D.K., Nasedkin A.V., Nasedkina A.A., Oganessian P.A., Skaliukh A.S., Soloviev A.N. Models of active bulk composites and new opportunities of ACELAN finite element package. *Wave dynamics and mechanics of composites for analysis of microstructured materials and metamaterials. Ser. Advanced Structured Materials*, 2017, vol. 59, pp. 133-158. DOI

Поступила в редакцию 09.10.2017; опубликована в электронном виде 30.12.2017

---

Сведения об авторах

Наседкин Андрей Викторович, дфмн, проф., гнс, и.о. зав. каф., Южный федеральный университет (ЮФУ), 344090, Ростов-на-Дону, ул. Мильчакова, д. 8а; e-mail: nasedkin@math.sfedu.ru

Корниевский Александр Сергеевич, магистрант, ЮФУ; e-mail: alexandr5koren@gmail.com