



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

ÚSTAV MECHANIKY TĚLES, MECHATRONIKY
A BIOMECHANIKY

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

INSTITUTE OF SOLID MECHANICS, MECHATRONICS AND BIOMECHANICS

NUMERICKÉ MODELOVÁNÍ CHOVÁNÍ ČÁSTICOVÉHO KOMPOZITU SE SESÍŤOVANOU POLYMERNÍ MATRICÍ

NUMERICAL MODELING OF BEHAVIOR OF A PARTICLE COMPOSITE WITH CROSSLINKED
POLYMER MATRIX

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. BOHUSLAV MÁŠA

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. LUBOŠ NÁHLÍK, Ph.D.

BRNO 2011

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav mechaniky těles, mechatroniky a biomechaniky

Akademický rok: 2010/2011

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

student(ka): Bc. Bohuslav Máša

který/která studuje v **magisterském studijním programu**

obor: **Inženýrská mechanika a biomechanika (3091T041)**

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Numerické modelování chování částicového kompozitu se sesít'ovanou polymerní maticí

v anglickém jazyce:

Numerical modeling of behavior of a particle composite with crosslinked polymer matrix

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Diplomová práce je zaměřena na modelování chování částicového kompozitu s polymerní maticí. Mechanické vlastnosti polymerních materiálů lze zlepšit přidáním tuhých částic (např. na bázi keramiky), které významně ovlivňují makroskopické chování kompozitu. Cílem práce je stanovení makroskopického chování částicového kompozitu se sesít'ovanou hyperelastickou maticí (na bázi PMMA) při různých objemových množstvích částic, zatíženého tahem. Numerické modely vezmou do úvahy také tvar a rozložení částic, hyperelastické chování matrice, případně porušení kompozitu. K numerickým výpočtům bude použit MKP systém Ansys.

Cíle diplomové práce:

- Seznámení se studovanou problematikou a literární rešerše zaměřená na studovanou problematiku
- Sestavení numerického modelu beroucího do úvahy nelineární chování matrice
- Numerická analýza uvedeného problému za pomoci MKP (systém Ansys)
- Porovnání získaných výsledků s experimentálními daty

Seznam odborné literatury:

1. R.W.Ogden: Non-linear elastic deformations. Dover Publications, Inc., New York,1997.
2. L.R.G.Treloar: The Physics of Rubber Elasticity. Oxford University Press, 2005.
3. A.S.Wineman, K.R.Rajagopal: Mechanical Response of Polymers. Cambridge University Press, 2000.
4. V.V.Vasiliev, E.V.Morozov: Advanced Mechanics of Composite Materials. Elsevier, Amsterdam, 2007.

Vedoucí diplomové práce: doc. Ing. Luboš Náhlík, Ph.D.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2010/2011.

V Brně, dne 15. 11. 2010

L.S.

prof. Ing. Jindřich Petruška, CSc.
Ředitel ústavu

prof. RNDr. Miroslav Doupovec, CSc.
Děkan

Abstrakt

Diplomová práce se zabývá stanovením makroskopického chování částicového kompozitu se sesíťovanou polymerní maticí zatíženého tahem. Hlavním cílem práce je určení mechanických vlastností kompozitu při tahovém zatížení za pomoci numerických metod (zejména metody konečných prvků). Vyšetřovaný kompozit je složen z matrice v kaučukovitém stavu a z tuhých částic na bázi oxidu hliníku (Al_2O_3). Hyperelastické vlastnosti matrice byly popsány pomocí Mooney-Rivlinova modelu materiálu. V úvahu byly brány různé konfigurace rozmístění částic, jejich odlišný tvar, orientace a rozlišené objemové množství, pro něž byly vytvořeny numerické modely, přičemž bylo vzato do úvahy také porušování matrice kompozitu. Výsledky výpočtů jsou porovnány s experimentálními daty, přičemž byla konstatována dobrá shoda mezi numerickými modely s porušováním matrice a experimentálními daty.

Keywords

sesíťovaný polymer, částicový kompozit, MKP, hyperelastická, Mooney-Rivlin

Abstract

The master's thesis deals with the determination of macroscopic behavior of a particulate composite with cross-linked polymer matrix under tensile load. The main focus of thesis is estimation of mechanical properties of a composite loaded by tensile loading using numerical methods (especially finite elements method). Investigated composite is composed of matrix in a rubbery state filled by alumina-based particles (Al_2O_3). Hyperelastic properties of the matrix have been modeled by the Mooney-Rivlin material model. Different compositions of particles, their different shape, orientation and different volume fractions have been considered. For all these characteristics of composite numerical models have been developed. The damage mechanisms of the matrix have also been taken into account. Results of numerical analyses have been compared with experimental data and good agreement between numerical models with damage mechanisms of matrix and experimental data has been found.

Klíčová slova

cross-linked polymer, particulate composite, FEM, hyperelasticity, Mooney-Rivlin

Bibliografická citace

MÁŠA, B. *Numerické modelování částicového kompozitu se sesíťovanou polymerní maticí*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2011. 54 s. Vedoucí diplomové práce doc. Ing. Luboš Náhlík, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně a v seznamu literatury a pramenů uvedl veškeré informační zdroje, které jsem použil.

Brno 26. dubna 2011

.....

Děkuji vedoucímu mé práce, panu docentu Luboši Náhlíkovi, za odborné vedení, rady a konzultace, které byly poskytnuty prakticky v jakoukoliv denní dobu. Velmi si vážím jeho vstřícné pomoci, přátelskou atmosféru po celou dobu řešení problému a ochotné poskytnutí potřebných materiálních prostředků. Mé díky patří i doktoru Ivánovi, jehož kvalifikovaná konzultace výrazným způsobem ovlivnila rychlost zpracování mé práce. Děkuji mé rodině, která mi umožnila studovat vysokou školu. Jejich trpělivost, opora a motivace mne dovedla až k ukončení vysoké školy a má práce je tedy částečně i jejich výsledkem. V neposlední řadě děkuji svým přátelům, jejichž trpělivost byla často kvůli této práci zkoušena, nicméně i přesto jsem vždy cítil jejich podporu.

Obsah

1	ÚVOD	16
2	PROBLÉMOVÁ SITUACE	17
2.1	Formulace problému	17
2.2	Výběr metody řešení	17
3	FORMULACE CÍLŮ	18
4	ÚVOD DO PROBLEMATIKY POLYMERNÍCH MATERIÁLŮ	19
4.1	Historie polymerů.....	19
4.2	Základní rozdělení polymerů	19
4.3	Struktura polymerů	20
4.4	Základní fyzikální předpoklady polymerů.....	21
4.5	Vliv sífování na mechanické vlastnosti polymeru	22
5	REŠERŠNÍ STUDIE	23
5.1	Možnosti modelování nelineárních materiálů	23
5.2	Typy hyperelastických konstitutivních modelů	23
5.2.1	Neo-Hookeův konstitutivní model	24
5.2.2	Arruda-Boyceův konstitutivní model.....	24
5.2.3	Mooney-Rivlinův konstitutivní model	24
5.2.4	Ogdenův konstitutivní model	25
5.3	Možnosti modelování částicových kompozitů	25
6	MODEL MATERIÁLU ZESÍŤOVANÉHO POLYMERU	26
6.1	Volba konstitutivního modelu materiálu	26
6.2	Experiment a získaná data.....	26
6.3	Stanovení konstant Mooney Rivlinova konstitutivního modelu	27
6.4	Ověření fyzikální korektnosti navrženého materiálu	28
7	MODEL KOMPOZITU BEZ UVÁŽENÍ PORUŠOVÁNÍ MATRICE	32
7.1	Variability v kompozitu	32
7.1.1	Tvar částic.....	32
7.1.2	Rozmístění částic v matici.....	32
7.1.3	Poměrné objemové množství částic	32
7.2	Tvorba numerických modelů.....	33
7.2.1	Výpočtová geometrie kompozitu	33
7.2.2	Diskretizace numerického modelu kompozitu	34
7.2.3	Okrajové podmínky	35
7.2.4	Nastavení řešiče	36
7.3	Numerické řešení problému.....	36
7.3.1	Výsledky numerického modelování pro poměrné objemové množství částic kompozitu 17,3%.....	36

7.3.2	Výsledky numerického modelování pro poměrné objemové množství částic v kompozitu 42,8%.....	37
7.4	Diskuze dalšího možného postupu.....	38
8	MODEL KOMPOZITU S UVÁŽENÍM PORUŠENÍ MATRICE.....	40
8.1	Lokalizace mechanismus porušení.....	40
8.1.1	Modelování pomocí modelu kohezivní zóny	41
8.1.2	Modelování pomocí metody Birth and Death.....	42
8.1.3	Modelování pomocí řízené změny okrajových podmínek v průběhu výpočtu	43
8.1.4	Modelování inženýrským přístupem	44
9	DISKUZE ZÍSKANÝCH VÝSLEDKŮ	48
10	ZÁVĚR	51
11	CITOVANÁ LITERATURA	53

1 Úvod

Kompozitní materiály nabývají v dnešní době velikého rozmachu v technické praxi. Výhodou je jejich nepředstavitelná variabilita použitelnosti. Ať se jedná o částicový kompozit, dlouho/krátko vláknový kompozit či laminát – společným jmenovatelem jsou vlastnosti výsledného materiálu, optimálně navrženého k předpokládané funkci. Vhodným skládáním různých materiálů o různé geometrické konfiguraci a odlišných materiálových vlastnostech lze docílit parametrů, které splňují mnohdy náročné požadavky z hlediska pevnosti, tuhosti, hmotnosti či ekonomičnosti celé konstrukce.

Z hlediska fyziky materiálu však kompozitní materiály vykazují chování, které u běžných konstrukčních materiálů není známo. Vzniklá potřeba tyto mechanické fenomény lépe poznat a popsat určuje směr aktuálního výzkumu u těchto pokročilých materiálů. Vytváří se nové metody materiálových zkoušek, nové popisy modelů materiálu, teorie lomové mechaniky apod. Tato práce si bere za cíl přispět k tomuto úsilí.

Budiž podotknuto již v úvodu, že následující text lze chápat jako pokračování autorovy bakalářské práce (Máša, 2009), úspěšně obhájené v červnu 2009. Cílem předchozí práce bylo stanovení efektivních materiálových charakteristik kompozitů na bázi polymerů. Byl v ní nalezen vhodný analytický vztah pro odhad modulu pružnosti v tahu částicového kompozitu, který byl podpořen numerickými výpočty. Předchozí práce však uvažovala pouze elastické vlastnosti obou složek materiálu a sloužila tak k rychlému a hrubému odhadu.

Nynější snahou je zpřesnit problematiku o komplikace, které v předchozím řešení nebyly zahrnuty, jelikož přesahovaly rámec zadání, tedy uvažování materiálových nelinearit a zahrnutí mechanismu porušení matrice.

Poznamenejme, že práce spadá do problematiky řešené vedoucím diplomové práce v rámci grantu GA ČR 106/08/1409 a výsledky této práce byly částečně publikovány (Náhlík, a kol., 2011), (Náhlík, a kol.).

2 Problémová situace

Problémová situace je podle literatury (Janíček, 2007) takový nestandardní stav entity (v našem případě kompozitního materiálu), který z objektivních nebo subjektivních důvodů vyžaduje řešení s určitým vymezeným cílem, přičemž proces řešení není rutinní. Řešitel musí využívat informační, hodnotící, tvůrčí a rozhodovací činnosti a hledat vhodné metody řešení.

Předložená diplomová práce je zaměřena na odhad mechanických vlastností částicového kompozitu se sesíťovanou polymerní maticí a tuhými částicemi. Tento druh kompozitu je hojně využíván jako konstrukční materiál, těsnící materiál, ochranný organický povlak, dentální materiál nebo tuhá výbušnina. Je tedy bezpodmínečně nutné mít k dispozici nástroje k popisu jeho hlavních materiálových charakteristik.

2.1 Formulace problému

S přihlédnutím k předchozímu popisu, zadání práce a znalosti potřeb technické praxe je problém definován takto:

Určení makroskopické tahové křivky částicového kompozitu se sesíťovanou polymerní hyperelastickou maticí zatíženou tahem. Problém bude respektovat následující podmínky.

2.2 Výběr metody řešení

Pro řešení problému určení makroskopického modulu pružnosti v tahu částicového kompozitu se sesíťovanou hyperelastickou polymerní maticí zatíženou tahem pro podmínky uvedené ve formulaci problému bylo zvoleno výpočtové modelování spojené se vstupními experimentálními daty.

3 Formulace cílů

Cíle práce byly zadány následovně:

- seznámení se studovanou problematikou a literární rešerše zaměřená na tuto oblast,
- sestavení numerického modelu beroucího do úvahy nelineární chování matrice,
- numerická analýza uvedeného problému za pomoci MKP (systém Ansys).
- porovnání získaných výsledků s experimentálními daty.

Výše uvedené obecné cíle byly konkretizovány do následujících bodů.

- Na základě rešeršní studie literatury formulovat základní problematiku spjatou s polymery. Konkrétněji - popsat charakteristické materiálové vlastnosti, mechanické projevy a možnosti jejich modelování.
- Vytvoření modelu materiálu zesíťovaného polymeru, který respektuje základní fyzikální vlastnosti vzorku, jež byl experimentálně odzkoušen.
- Provést studii, která bere v úvahu variabilitu rozmístění tuhých částic v polymeru a tvar těchto částic. Pro každou modifikaci budou uvažovány různé objemy plnění. Výsledky budou následně porovnány s experimentálními daty.
- Provést studii, která bere v úvahu porušování kompozitu. Výsledky budou opět konfrontovány s reálnými zkouškami materiálu.

4 Úvod do problematiky polymerních materiálů

Polymer je hlavním stavebním prvkem výsledného kompozitu. Propůjčuje mu jeho charakteristické vlastnosti, který nemá žádný jiný klasický konstrukční materiál. K lepšímu pochopení chování polymerů mají sloužit následující řádky, věnované tomuto dynamicky se vyvíjejícímu se materiálu.

4.1 Historie polymerů

Jelikož je polymer poměrně nový druh materiálu, pokusíme se ve zkratce nastínit jeho historii a postupné uplatňování do průmyslové výroby. Jelikož se jedná o materiál rychle se vyvíjející, omezíme se tedy jenom na základní historické milníky.

Počátky polymerů, jak lze vyčíst z literatury (Treloar, 2005), (Ducháček, 2006) začínají u přírodního kaučuku, jenž je zároveň nejrozšířenější skupinou elastomerů. Slovo kaučuk vychází ze slova Mayských indiánů "Cau-Uchu", což v překladu znamená „plačící dřevo“. Jedná se prakticky o přírodní latex vytékající z naříznutých stromů *Hevea Braziliensis*. Byl objeven při druhé Kolumbově plavbě do Jižní Ameriky r. 1493. Roku 1736 se kaučuk dostává do Evropy a až o šedesát let později se mu dostává komerčního využití, jako byly nepromokavé lodní plachty a pytle na přepravu pošty. Vlastnosti tohoto materiálu však vykazovaly vysokou závislost na teplotě okolí.

Tento problém byl vyřešen Američanem Charlesem Goodyearem a Angličanem Thomasem Hancockem a to vulkanizací kaučuku. Jedná se o proces, kdy se kaučuk zahřívá společně se sírou a vzniká tím nový materiál – pryž. Pro zajímavost uvedme, že slovo vulkanizace je odvozené od jména řeckého boha Vulkána, jenž je s ohněm a sírou spojován.

S rostoucí činností průmyslu vznikala potřeba vyrábět materiály, které by měly elastické vlastnosti a byly by vyráběny uměle. Etapu syntetických polymerů zahájil v roce 1835 Henri Victor Regnault tím, že připravil první syntetický plast, polyvinylchlorid (PVC). A byl to právě Regnault, kdo zavedl pojem polymer. Průmyslová výroba PVC byla zavedena až v roce 1925 v Německu společností Farbenindustrie (I. G. Farben), kdy se PVC objevil pod obchodním názvem Igelit. Od počátku 20. století pak dochází doslova k explozivnímu rozvoji polymerů, vyvíjí se nepřeborné množství modifikací a objevují se nové možnosti využití těchto materiálů.

4.2 Základní rozdělení polymerů

Podle Ducháčka (2006) jsou polymery látky mající rozmanité vlastnosti. Jsou uspořádány do velkých molekul, které obsahují převážně prvky C, H, O, N, Cl. Vyskytují se v tuhém stavu, nicméně v procesu zpracování jsou kapalné. Za

působení tepla a tlaku mají schopnost udělit výslednému výrobku jakýkoliv tvar. Dělení polymerů ukazuje Tabulka 4.1.

Tabulka 4.1: Základní rozdělení polymerů z hlediska jejich chování

POLYMERY		
ELASTOMERY	PLASTY	
KAUČUKY	TERMOPLASTY	REAKTOPLASTY

Elastomer je dále, podle uvedené literatury, definován jako vysoce elastický polymer, který je možno za běžných podmínek deformovat o stovky procent, přičemž tyto deformace jsou převážně vratné.

Plasty jsou polymery za běžných podmínek většinou tuhé, přičemž se zvyšující teplotou se stávají plastickými. Pokud je změna z plastického stavu do tuhého vratná, hovoříme o skupině s názvem **termoplasty**. Jestliže však tato změna je nevratná, jedná se o **reaktoplasty**.

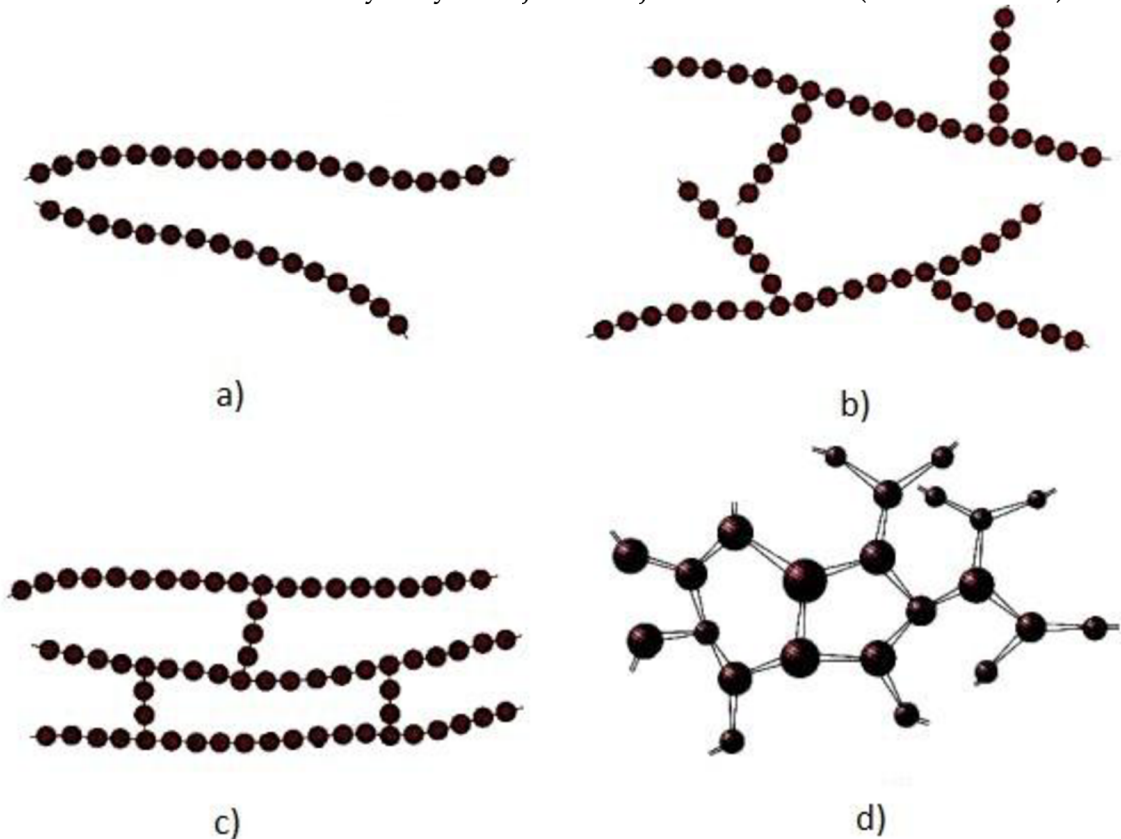
4.3 Struktura polymerů

Polymer (Ducháček, 2006) je látka sestávající z molekul jednoho nebo více druhů atomů nebo skupin spojených navzájem v tak velkém počtu, že fyzikální a chemické vlastnosti této látky se nezmění přidáním nebo odebráním jedné nebo několika konstitučních jednotek. Touto konstituční jednotkou, opakující se v celé molekule je tzv. monomer. Typická vlastnost polymerů, jež je odlišuje od jiných materiálů, je řetězcová struktura jejich molekul, tj. dlouhá lineární řada vzájemně spojených atomů nebo skupin atomů, představující charakteristickou strukturu materiálu.

Podle Masarykovy univerzity, Pedagogické fakulty, Katedry fyziky (2006) dělíme polymery v závislosti na seřazení řetězců na tyto typy:

- **lineární polymery**, kde jsou jednotlivé monomery seřazeny za sebou, takže vytvoří jednoduchý řetězec. Mezi těmito pružnými řetězci působí slabé Van der Waalsovy vazby (Obrázek 4.1a);
- **rozvětvené polymery**, jejichž makromolekula se vyznačuje hlavním řetězcem, z něhož vystupují postranní „větve“. Celá struktura má menší hustotu než lineární polymery (Obrázek 4.1b);
- **polymery se zkříženými články**, kde sousední řetězce těchto polymerů jsou mezi sebou propojeny články, které jsou vázány pomocí silné kovalentní vazby. Právě sem patří elastické materiály, jako je např. přírodní syntetický kaučuk (Obrázek 4.1c);

- **sesíťované polymery**, což jsou trojrozměrné monomery, které mají tři aktivní kovalentní vazby a vytvářejí tak trojrozměrnou síť (Obrázek 4.1d).



Obrázek 4.1: Zobrazení struktur polymerů, a) lineární, b) rozvětvený, c) se zkříženými články, d) sesíťovaný.

V dalším textu se již budeme zabývat výhradně sesíťovanými polymery a vlivem sesíťování na jeho mechanické vlastnosti.

4.4 Základní fyzikální předpoklady polymerů

To, co dělá polymer specifickým materiálem, jsou následující tři teoretické předpoklady (Treloar, 2005):

1. přítomnost molekul v dlouhých řetězcích, které mají volné rotační vazby,
2. slabé sekundární síly mezi molekulami,
3. vnitřní spojování molekul na několika místech podél jejich délky, čímž vznikne trojrozměrná síť.

První předpoklad říká, že je řetězec ohebný. Jeho ohebnost (Meissner, a kol., 1987) je podmíněna možností rotace kolem jednoduchých vazeb v řetězci. Důsledkem těchto vnitřních rotací je, že se části řetězce dostávají do různých poloh, takže je vždy dosaženo ideálního tvaru tak, aby bylo dosaženo minima potenciální energie v systému. Ideální tvar se ovšem může s časem měnit. Tvar řetězce se působením

vnějších sil snadno pozměňuje, je vratný, a právě takhle schopnost podmiňuje vnější projevy, které se u žádných jiných materiálů neobjevují. Ten nejvýznamnější je právě schopnost velkých vratných deformací při účinku již malých sil, v literatuře označovaná též jako kaučukovité chování.

Druhý předpoklad (Treloar, 2005) je vyjádřením volného pohybu jednoho řetězce mezi druhými, díky čemuž může zaujmout libovolnou polohu, což jak bylo zmíněno v předchozím odstavci, je základem kaučukovitého chování. Je jasné, že jednotlivé molekuly jsou na některých místech spojeny chemickými vazbami, nicméně předpoklad malých sekundárních sil mezi samotnými molekulami zajišťuje volný pohyb řetězců. Jinými slovy by se také dalo říci, že nebylo-li by primárních chemických vazeb a nepůsobily by molekuly na sebe sekundárními silami, materiál by se nechoval jako tuhý, ale jako tekutina.

Třetí předpoklad říká, že vznikem určitého počtu uzlů mezi řetězci na několika málo místech podél jejich délky je možno dosáhnout souvislé sítě. V této síti jsou molekuly pospojovány navzájem, nemohou se volně pohybovat jako v tekutině, ale je stále dostatečně zajištěna možnost každému řetězci v síti zaujmout ideální polohu v souladu s prvním a druhým předpokladem.

4.5 Vliv síťování na mechanické vlastnosti polymeru

Zavedením příčné vazby mezi makromolekulami konečné délky vznikne reálná síť (Meissner, a kol., 1987). K vysvětlení vlivu síťování na elastické vlastnosti polymeru je třeba nadefinovat následující pojmy:

- **elasticky účinný uzel** je takový uzel, vedou-li z něj alespoň 3 nezávislé cesty k okraji systému;
- **elasticky účinný řetězec** je takový řetězec, který spojuje dva elasticky účinné uzly sítě.

Pouze elasticky účinný řetězec v síti je schopný přenášet vnější napětí, hovoříme o takzvaně elasticky aktivním řetězci. Koncentrace elasticky účinných řetězců sítě určuje elastické vlastnosti celé sítě a tato koncentrace zásadním způsobem ovlivňuje odpor proti deformaci.

V návaznosti na kapitolu 4.4 se dá vliv síťování interpretovat i tak, že se zvyšujícím se počtem účinných elastických uzlů v síti bude více potlačován volný pohyb jednotlivých řetězců. Důsledkem bude snižování kaučukovitého chování materiálu, přičemž vnějším projevem bude potřeba větších sil na deformaci sítě, čímž schopnost vykazovat velké vratné deformace bude menší.

5 Rešeršní studie

5.1 Možnosti modelování nelineárních materiálů

Klasické konstrukční materiály (např. oceli) bývají zpravidla používány tak, aby v konstrukcích z nich vyrobených nevznikaly plastické deformace. Pohybujeme se tedy v oblasti pod mezí kluzu. V této oblasti je materiál homogenní, elastický, izotropní, a poněvadž respektuje Hookův zákon, vykazuje lineární závislost napětí v materiálu na jeho přetvoření. Takový materiál lze popsat dvěma elastickými konstantami a to modulem pružnosti v tahu a Poissonovým číslem.

V případě polymerů, které obecně nerespektují Hookův zákon, je třeba hledat jiné možnosti popisu jeho materiálových vlastností. Vykazovaná závislost napětí na přetvoření je obvykle silně nelineární. Určitá možnost by byla po částech linearizovaný popis, nicméně jakýkoliv typ lineární idealizace není schopný dostatečně přesně tuto závislost popsat.

Pro popis polymerů se často používá speciální, hyperelastický konstitutivní model. Je to model ideálně elastického materiálu, jehož závislost napětí na přetvoření je odvozena z funkce hustoty deformační energie.

Typickým představitelem materiálu, který zcela splňuje všechny předpoklady na použití tohoto konstitutivního modelu, je pryž. Stejně tak lze použít hyperelastický model materiálu na chování většiny vulkanizovaných elastomerů. Závislost napětí pryže, a jemu podobných elastomerů, na přetvoření může být definován jako nelineární, elastický, izotropní, nestlačitelný a obecně nezávislý na rychlosti deformace. Zbytek polymerů a biologické tkáně jsou také často modelovány pomocí tohoto konstitutivního modelu, nicméně musí být bráno v potaz, že tyto materiály částečně idealizujeme.

Modelování hyperelastických materiálů je v literatuře dobře popsáno. Nejčastěji používané modely materiálů jsou uvedeny v následující kapitole.

5.2 Typy hyperelastických konstitutivních modelů

Mezi první hyperelastické modely materiálu patřily Neo-Hookeův model a Mooney-Rivlinův model odvozené Ronaldem Rivlinem a Melvinem Mooneyem. Od té doby byla přestavena celá řada jiných modelů, které se úspěchem používají při modelování polymerů, přičemž všechny jsou založeny na funkci hustoty deformační energie. Výjimku pak tvoří modely založené na statistické mechanice polymerních řetězců. V následujících podkapitolách bude představen přehled těch nejnámějších, které jsou zároveň implementovány do systému Ansys, který byl v rámci řešení diplomové práce použit.

5.2.1 Neo-Hookeův konstitutivní model

Tento konstitutivní model hyperelastického materiálu (Ogden, 1997) je podobný Hookově zákonu a může být použit pro odhad nelineární závislosti napětí na přetvoření i za předpokladu velkých deformací. Model byl navržen Ronaldem Rivlinem v roce 1948 a patří mezi první v této oblasti. Závislost mezi napětím a přetvořením je zpočátku lineární, v určitém okamžiku se však stává plošší. Tento model předpokládá dokonalou elasticitu v každé fázi deformace. Je založen na statistické mechanice sesíťovaných polymerních řetězců a je použitelný pro plasty a materiály vykazující kaučukovité chování.

V zásadě se materiál chová tak, že se jednotlivé řetězce mohou v síti v počátku zatěžování deformovat relativně volně. Nicméně v určitém bodě se elasticky účinné řetězce natáhnou do maximální možné míry, což způsobí dramatický nárůst modulu pružnosti v tahu materiálu. Neo-Hookeův model nezahrnuje nárůst tohoto modulu pružnosti v tahu při velkých deformacích a jeho typická přesnost je při nižších přetvořeních do 20%. Model taky nedostatečně popisuje dvouosou napjatost a byl nahrazen sofistikovanějším Mooney-Rivlinovým modelem.

5.2.2 Arruda-Boyceův konstitutivní model

V mechanice kontinua (Ogden, 1997) bývá tento konstitutivní model používán pro popis mechanického chování pryže a jiných polymerních materiálů. Je založen na statistické mechanice materiálu. Reprezentativním objemem je krychlový element, jenž obsahuje osm řetězců podél jeho diagonálních směrů. Předpokladem je nestlačitelný materiál.

Pro malé deformace se problém tohoto modelu redukuje na Gaussovu síť založenou na Neo-Hookeově modelu.

5.2.3 Mooney-Rivlinův konstitutivní model

Klasický Mooney-Rivlinův model (Ogden, 1997) je model hyperelastického chování materiálu, kde funkce hustoty deformační energie W je lineární kombinací dvou redukovaných invariantů Cauchy-Greenova tenzoru přetvoření. Model byl zveřejněn Ronaldem Rivlinem a Melvinem Mooneyem ve dvou nezávislých člancích v roce 1952.

Základní tvar funkce hustoty deformační energie pro nestlačitelný materiál Mooney-Rivlinůva modelu je:

$$W = C_1(\bar{I}_1 - 3) + C_2(\bar{I}_2 - 3), \quad (1)$$

kde C_1 a C_2 jsou empiricky zjištěné materiálové konstanty a \bar{I}_1 a \bar{I}_2 jsou první a druhý modifikovaný invariant Cauchy-Greenova tenzoru přetvoření.

Elastická odezva materiálů vykazující pryžové chování bývá často založena na Mooney-Rivlinově modelu. Konstanty C_1 a C_2 bývají určeny fitem

experimentálních dat. Doporučenými testy k získání potřebných dat jsou zkouška jednoosým tahem, zkouška dvouosým tahem, smyková zkouška, zkouška jednoosým tahem se zabráněnou příčnou deformací a objemová zkouška.

Dvouparametrický Mooney-Rivlinův model je obvykle platný do přetvoření menších jak 100%.

5.2.4 Ogdenův konstitutivní model

Ogdenův model (Ogden, 1997) je další z modelů hyperelastických materiálů pro popis nelineárního chování pryží, polymerů a biologických látek. Byl navržen R.W. Ogdenem v roce 1972 a je založen opět na funkci hustoty deformační energie. Materiály, na které se hodí tento popis, lze obecně charakterizovat jako izotropní, nestlačitelné.

5.3 Možnosti modelování částicových kompozitů

K nezbytnému modelování částicového kompozitu byla vybrána jako vhodná metoda konečných prvků. V literatuře (Sun, a kol., 2006), (Sun, a kol., 2007) lze najít aplikace této metody k simulování polymerů, konkrétně na studium konstitutivních vztahů. Konkrétně - byl zjišťován vliv plniva na modul pružnosti v tahu a Poissonův poměr.

Jelikož 2D úlohy neposkytují dostatečně uspokojivé výsledky (Iung, a kol., 1995), je třeba přistoupit k 3D modelování. V literatuře se též objevují způsoby řešení (LLorca, a kol., 2004), kdy se geometrie, na níž se realizuje problematika kompozitu, skládá z více částic náhodně distribuovaných v matici. Tento přístup je nezbytný v případě, že stanovujeme koncentrace napětí způsobené interakcí jednotlivých částic.

K určení makroskopického chování kompozitu metodou konečných prvků byly úspěšně použity numerické modely založené na elementární, periodicky se opakující buňce (Sun, a kol., 2006), (Marur, 2004). Navíc bylo publikováno (Sun, a kol., 2007), (Segurado, a kol., 2003) že z makroskopického hlediska tvar nebo shlukování částic hraje ve srovnání s vlivem změny poměrného objemu částic v kompozitu nevýznamnou roli.

Na základě výše uvedených studií byl k modelování metodou konečných prvků vybrán model elementární, periodicky se opakující jednotkové buňky.

6 Model materiálu zesíťovaného polymeru

V následující kapitole bude popsán celý postup návrhu vhodného konstitutivního modelu materiálu beroucího v potaz jeho hyperelastické vlastnosti.

Jako materiál matrice kompozitu slouží sesíťovaný polymethylmetakrylát (PMMA), běžně známý jako „plexisklo“ nebo akrylátové sklo. Jeho funkční vzorec je $(-\text{CH}_2\text{C}(\text{CH}_3)(\text{COOH}_3)-)_n$ a sumární vzorec $(\text{C}_5\text{O}_2\text{H}_8)_n$. Je to polymer s vlastnostmi termoplastu.

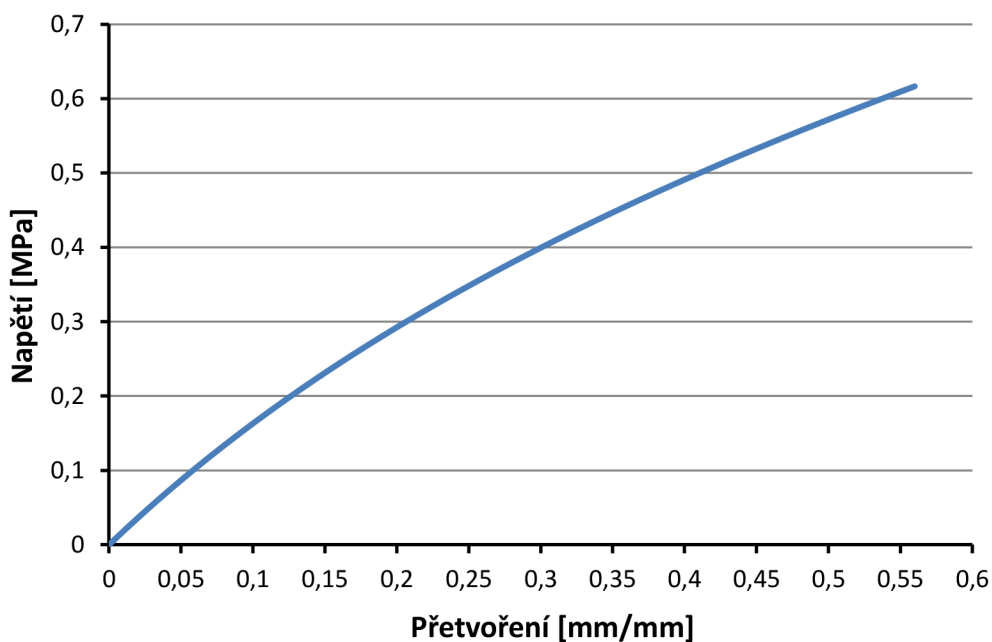
V rámci návrhu bude ověřena fyzikální korektnost konstitutivního modelu materiálu.

6.1 Volba konstitutivního modelu materiálu

Na základě předchozí rešeršní studie, zkušeností z analýz v mezinárodních publikacích a z analýz provedených na pracovišti předkladatele diplomové práce (ÚMTMB FSI VUT) byl k dalšímu postupu v praktické části zvolen Mooney-Rivlinův konstitutivní model.

6.2 Experiment a získaná data

Ke správnému určení materiálových charakteristik pro vypočtení potřebných materiálových konstant je třeba provést zkoušky, které byly zmíněny v kapitole 5.2.3. K dispozici byla však pouze data ze standardní jednoosé tahové zkoušky při 180°C. Data z ostatních materiálových zkoušek nebyla dostupná. K experimentu byl zvolen pro polymery typický vzorek ve tvaru „psí kosti“. Materiál matrice byl v kaučukovitém stavu. Výsledek experimentálního měření je uveden na obrázku 6.1.



Obrázek 6.1: Graf tahové zkoušky matrice

Přestože je doporučeno mít i jiné materiálové zkoušky, budiž připomenuto, že bude numericky modelována právě jednoosá tahová zkouška polymerního kompozitu. Dominantním namáháním tedy bude právě tahová napjatost. Jelikož dvourozměrná úloha nepodává kvalitativně relevantní výsledky a vše bude modelováno jako trojrozměrná úloha, bude vznikat i obecná trojosá napjatost (zejména na rozhraní matrice/částice). Vzniká potřeba na základě tahové zkoušky navržený materiál ověřit, zda se chová správně i při jiných druzích napjatosti.

6.3 Stanovení konstant Mooney Rivlinova konstitutivního modelu

Získaná data z tahové zkoušky, konkrétně napětí a přetvoření, byla uložena do souboru a upravena tak, aby mohla být načtena v systému Ansys V12.1. V samotném programu byl zvolen hyperelastický konstitutivní model materiálu a přes funkci „curve fitting“ byla do programu vložena data z jednoosé tahové zkoušky, přičemž data ze zkoušky dvouosým tahem, smykové zkoušky, zkoušky jednoosým tahem se zabráněnou příčnou deformací a objemové zkoušky jednoduše nebyla zadána.

Po načtení potřebných dat byl zvolen Mooney-Rivlinův konstitutivní model se třemi parametry, kde funkce hustoty deformační energie je vyjádřena vztahem:

$$W = C_{10}(\bar{I}_1 - 3) + C_{01}(\bar{I}_2 - 3) + C_{11}(\bar{I}_1 - 3)(\bar{I}_2 - 3) + \frac{1}{d}(J - 1)^2, \quad (2)$$

kde \bar{I}_1 je první modifikovaný invariant Cauchy-Greenova tenzoru přetvoření ($\bar{I}_1 = J^{-2/3}I_1$, kde $I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2$), \bar{I}_2 je druhý modifikovaný invariant Cauchy-Greenova tenzoru přetvoření ($\bar{I}_2 = J^{-4/3}I_2$, kde $I_2 = \lambda_1^2\lambda_2^2 + \lambda_2^2\lambda_3^2 + \lambda_3^2\lambda_1^2$), λ_1 , λ_2 a λ_3 jsou poměrná prodloužení v hlavních směrech, J je determinant deformačního gradientu, C_{10} , C_{01} a C_{11} jsou materiálové konstanty a d je parametr nestlačitelnosti materiálu. Poznamenejme, že vztah mezi poměrným prodloužením a přetvořením je $\varepsilon_i = \lambda_i - 1$, kde $i = 1, 2, 3$.

Nestlačitelnost materiálu (Poissonovo číslo $\nu = 0,5$) je v numerických analýzách zdrojem numerických problémů a může vést až k divergenci celé úlohy (zavedením nestlačitelnosti je modul objemové stlačitelnosti nekonečný). Počáteční modul objemové stlačitelnosti je definován následovně:

$$K = \frac{2}{d}, \quad (3)$$

kde parametr nestlačitelnosti materiálu je vyjádřen:

$$d = \frac{1 - 2 \cdot \nu}{C_{10} + C_{01}}. \quad (4)$$

Dosazením $\nu = 0,5$ nám vyjde parametr nestlačitelnosti nulový a tím pádem při výpočtu modulu objemové stlačitelnosti dělíme konstantu 2 touto nulou.

Z toho důvodu bylo v numerických výpočtech zavedeno Poissonovo číslo matrice $\nu_m = 0,4995$, což reprezentuje materiál minimálně stlačitelný, nicméně tímto částečně předcházíme případným numerickým komplikacím.

Materiálové konstanty sesíťovaného polymeru C_{10} , C_{01} a C_{11} byly určeny programem Ansys V12.1 následovně:

Tabulka 6.1: Materiálové konstanty sesíťovaného polymeru.

C_{10}	0,18560 MPa
C_{01}	0,12356 MPa
C_{11}	0,00351 MPa
d	0,00500 MPa

Parametr d byl dopočítán podle vztahů (3) a (4). Odchylka od tahové zkoušky byla spočítána programem jako blízká nule ($5,8 \cdot 10^{-8}$).

6.4 Ověření fyzikální korektnosti navrženého materiálu

Jelikož materiálové konstanty byly stanoveny za absence některých potřebných zkoušek, je třeba provést ověření, zda je navržený hyperelastický materiál fyzikálně korektní. To bylo provedeno na základě numerického modelování zbylých zkoušek s tím, že by výsledky měly odpovídat teoretickým předpokladům.

Numericky bylo provedeno modelování následujících materiálových zkoušek:

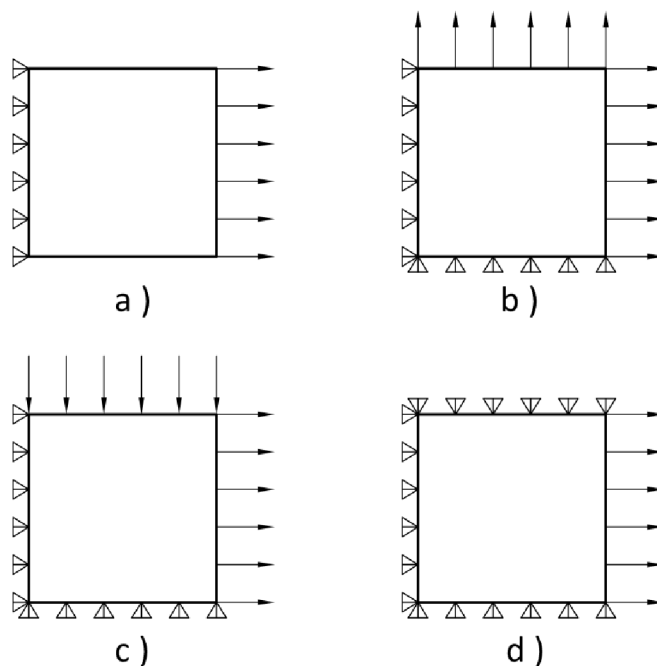
- zkouška jednoosým tahem,
- zkouška dvouosým tahem,
- smyková zkouška,
- zkouška jednoosým tahem se zabráněnou příčnou deformací.

Geometrií byl rovinný, čtvercový, jednotkový vzorek. Použitý prvek byl PLANE182. Příslušné okrajové podmínky znázorňuje Obrázek 6.2. Na stranách s šipkami byla předepsána deformační okrajová podmínka. Hodnota posuvu byla 0,25 a směr šipek znázorňuje jeho smysl.

Vyhodnocováno bylo první hlavní napětí, přičemž jeho hodnoty by v každém kroku zatěžování měly být v následujících relacích:

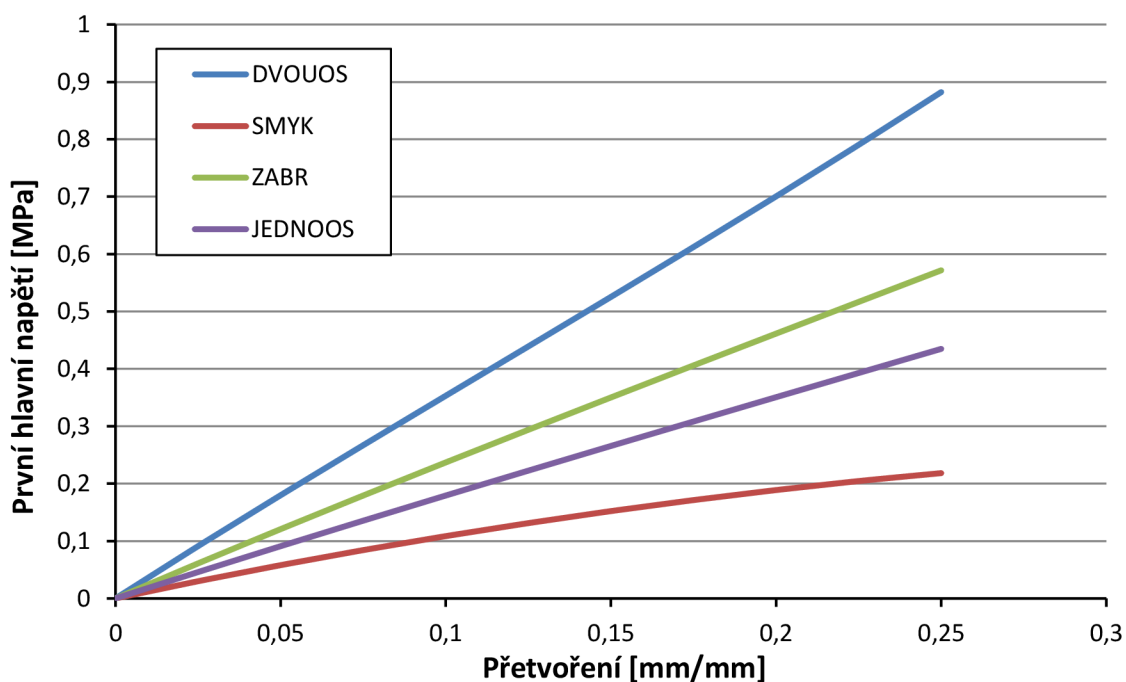
$$\sigma_{1,dvouos} > \sigma_{1,zabr} > \sigma_{1,jednoos} > \sigma_{1,smyk} \quad (5)$$

kde $\sigma_{1,dvouos}$ je první hlavní napětí zkoušky dvouosým tahem, $\sigma_{1,zabr}$ je první hlavní napětí zkoušky jednoosým tahem se zabráněnou příčnou deformací, $\sigma_{1,jednoos}$ je první hlavní napětí zkoušky jednoosým tahem a $\sigma_{1,smyk}$ je první hlavní napětí smykové zkoušky.



Obrázek 6.2: Znázornění okrajových podmínek při modelování jednotlivých zkoušek, a) zkouška jednoosým tahem, b) zkouška dvouosým tahem, c) smyková zkouška, d) zkouška tahem se zabráněnou příčnou deformací.

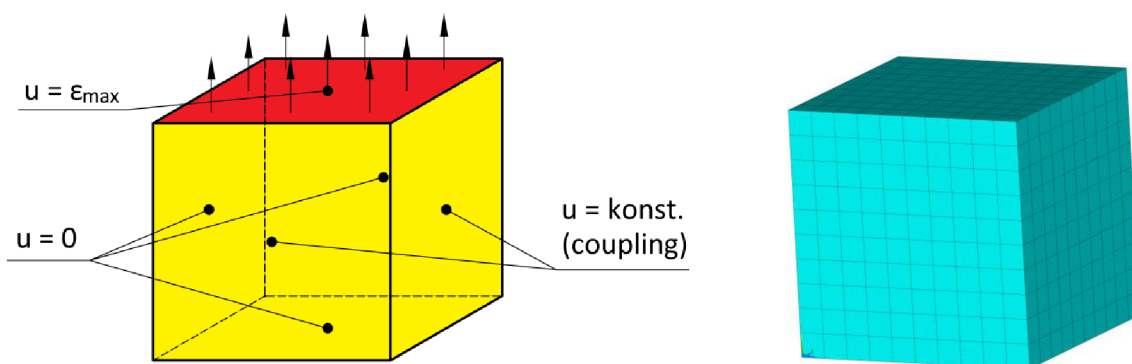
Po provedení numerického řešení byly získány následující průběhy prvního hlavního napětí:



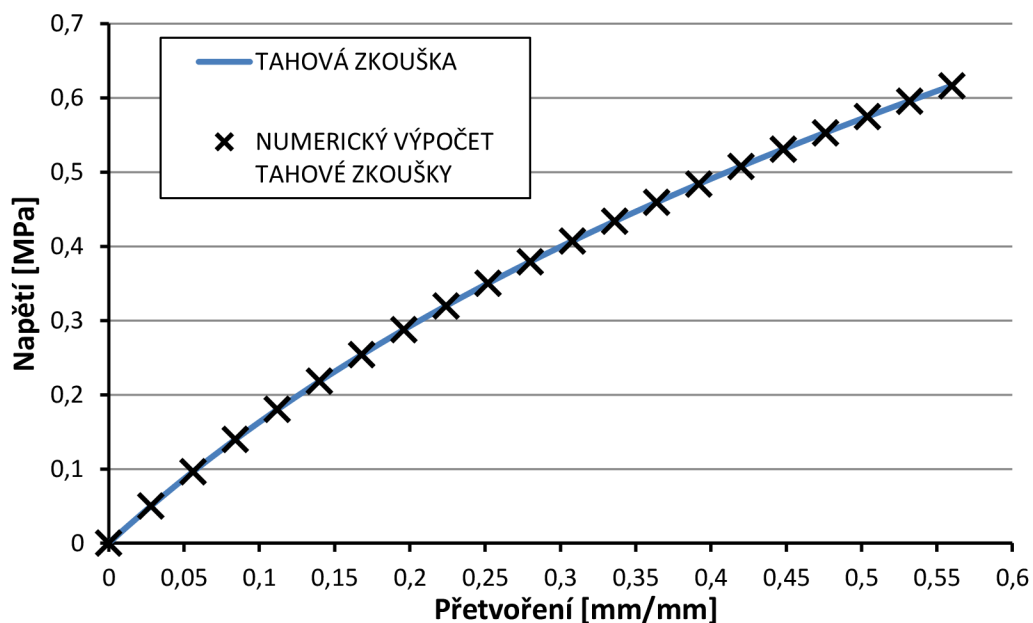
Obrázek 6.3: Průběhy prvních hlavních napětí jednotlivých modelovaných materiálových zkoušek.

Při pohledu na obrázek 6.3 je patrné, že předpoklad ze vztahu (5) je beze zbytku splněn.

Dalším testem bylo numerické modelování jednoosé tahové zkoušky trojrozměrné elementární buňky. Tato buňka má tvar krychle o jednotkové délce hrany a představuje infinitezimální objem zkoušeného materiálu. Okrajové podmínky byly aplikovány tak, aby respektovaly teoretické předpoklady (viz Obrázek 6.4) tedy, že všechny plochy zůstávají rovinnými. Vzhledem k jednotkové délce elementární buňky je velikost deformace v daném směru rovna přetvoření. Touto numerickou analýzou může být ověřen výsledek kvalitativně jednoduchým porovnáním výsledků s daty z experimentu. Potřebnou porovnávací hodnotu, tedy působící napětí, získáme součtem reakčních sil na ploše, na které je aplikováno posunutí. Opět platí, že vzhledem k jednotkové velikosti plochy je tento součet přímo roven porovnávacímu napětí.



Obrázek 6.4: Schéma aplikace okrajových podmínek a diskretizace elementární buňky matrice.



Obrázek 6.5: Graf porovnávací data z experimentu s numerickým výpočtem jednoosé tahové zkoušky.

Jak je vidět z grafu na obrázku 6.5, vypočtená hodnota napětí přesně odpovídá datům získaných na experimentálním měření.

Na základě předchozí verifikace fyzikální korektnosti Mooney-Rivlinova konstitutivního modelu materiálu můžeme konstatovat, že smí být použit pro modelování sesíťované polymerní matrice částicového kompozitu.

Pozn.: Dodejme, že pro další modelování kompozitu bude brán model materiálu tuhé částice na bázi oxidu hliníku Al_2O_3 jako lineární, homogenní, izotropní a elastický, mající modul pružnosti v tahu $E_p = 380\text{GPa}$ a Poissonovo číslo $\nu_p = 0,23$.

7 Model kompozitu bez uvážení porušování matrice

Následující kapitola je věnována studii, která bere v úvahu variabilitu rozmístění tuhých částic v polymeru a jejich tvar. Pro každou modifikaci budou uvažována různá objemová plnění kompozitu. Výsledky budou v závěru kapitoly porovnány s experimentálními daty. K numerické analýze byl použit komerční systém Ansys V12.1.

7.1 Variability v kompozitu

Jak bylo zmíněno v kapitole 5.3, na základě dobrých zkušeností z odborné literatury byla k numerickému modelování vybrána geometrie periodicky se opakující elementární jednotkové buňky. Pokusme se nyní definovat, jaké proměnné parametry budou do výpočtu vstupovat.

7.1.1 Tvar částic

Uvažovány byly dva základní tvary částic, a to:

- sférický (spherical particle - SP),
- elipsoidický - poměr hlavní osy k vedlejší je 2:1 (ellipsoidal particle - EP).

7.1.2 Rozmístění částic v matici

Uvažována byla tato uspořádání částic v matici:

- rozmístění charakteristické pro prostou kubickou mřížku (simple cubic – SC),
- rozmístění charakteristické pro kubickou mřížku prostorově středěnou (body-centered cubic – BCC),
- rozmístění charakteristické pro kubickou mřížku plošně středěnou (face-centered cubic – FCC).

7.1.3 Poměrné objemové množství částic

Poměrné objemové množství je dáno jako poměr objemu částic v kompozitu k celkovému objemu kompozitu. V úvahu byla vzata tato dvě poměrná objemová množství částic:

- 17,3% - odpovídá 30% hmotnostnímu podílu částic (17,3),
- 42,8% - odpovídá 60% hmotnostnímu podílu částic (42,8).

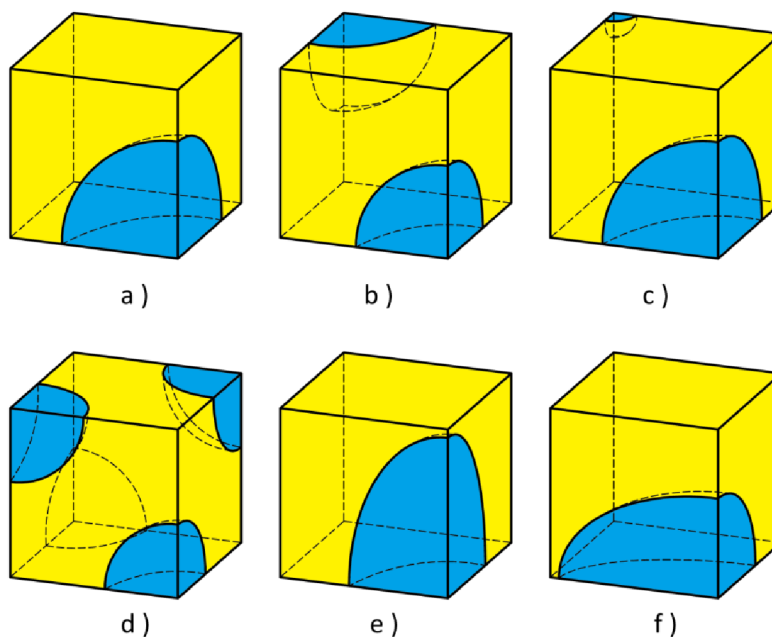
7.2 Tvorba numerických modelů

7.2.1 Výpočtová geometrie kompozitu

Kombinací předchozích variabilit bylo vybráno šest následujících výpočtových geometrií:

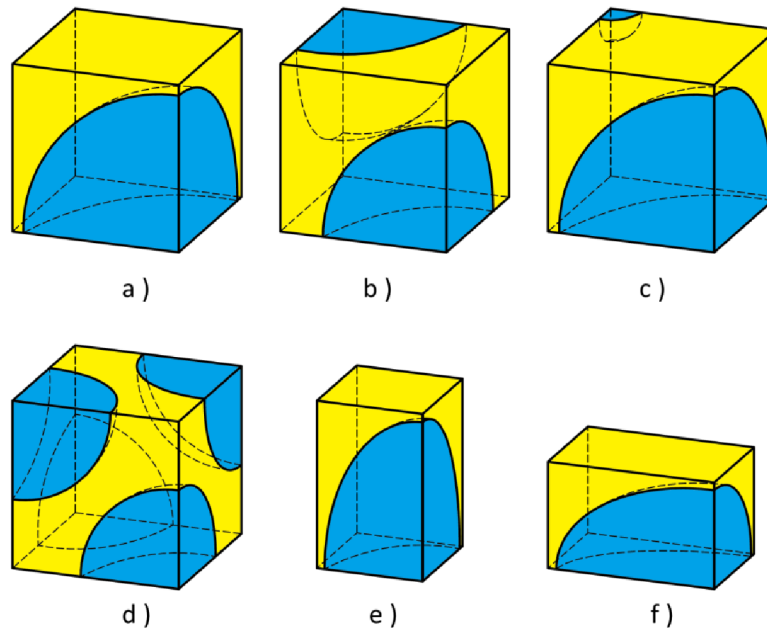
- sférické částice v prosté kubické mřížce (SP-SC-17,3, resp. SP-SC-42,8),
- sférické částice v kubické prostorově středěné mřížce (SP-BCC-17,3, resp. SP-BCC-42,8),
- sférické částice s variací velikosti (poměr 1:5) v kubické prostorové mřížce (SP-BCC-VAR-17,3, resp. SP-BCC-VAR-42,8),
- sférické částice v kubické plošně středěné mřížce (SP-FCC-17,3, resp. SP-BCC-42,8),
- elipsoidické částice v prosté kubické mřížce, orientace hlavní osy elipsoidické částice je ve směru vertikálním (EP-SC-VER-17,3, resp. EP-SC-VER-42,8),
- elipsoidické částice v prosté kubické mřížce, orientace hlavní osy elipsoidické částice je ve směru horizontálním (EP-SC-HOR-17,3, resp. EP-SC-HOR-42,8).

Všechna tato uspořádání byla uvažována pro obě studovaná poměrná objemová množství. Díky symetrii stačí jako model použít 1/8 charakteristické buňky, aby vznikl výpočtový model kompozitu, viz Obrázek 7.1, kde jsou znázorněny modifikace kompozitu pro poměrné objemové množství 17,3%.



Obrázek 7.1: Schéma výpočtové geometrie částicového kompozitu pro numerické modelování metodou konečných prvků pro poměrné objemové množství 17,3%, a) SP-SC-17,3, b) SP-BCC-17,3, c) SP-BCC-VAR-17,3, d) SP-FCC-17,3, e) EP-SC-VER-17,3, f) EP-SC-HOR-17,3.

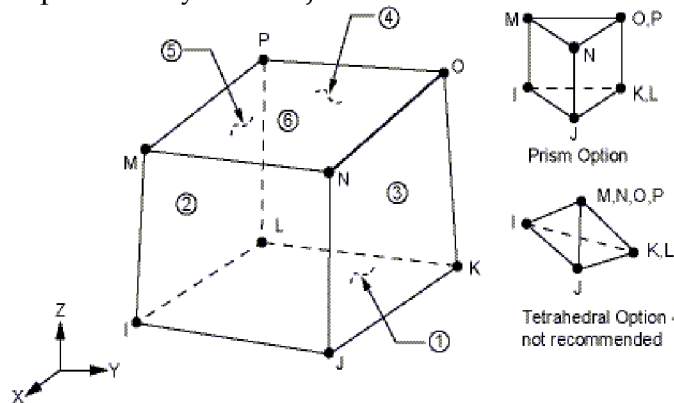
Na následujícím obrázku (Obrázek 7.2) je schematicky znázorněna výpočtová geometrie pro poměrné objemové množství 42,8%. Výrazné úpravy bylo zapotřebí při modelování EP-SC-VER-42,8 a EP-SC-HOR-42,8. Aby byl splněn poměr 2:1 elipsoidické částice a zároveň bylo dosaženo potřebného plnění, celková elementární buňka musela být upravena, takže již není jednotková ve všech rozměrech. Tento fakt byl brán v úvahu při vyhodnocování numerických analýz, tj. při výpočtu přetvoření a působícího napětí.



Obrázek 7.2: Schéma výpočtové geometrie částicového kompozitu pro numerické modelování metodou konečných prvků pro poměrné objemové množství 42,8%, a) SP-SC-42,8, b) SP-BCC-42,8, c) SP-BCC-VAR-42,8, d) SP-FCC-42,8, e) EP-SC-VER-42,8, f) EP-SC-HOR-42,8.

7.2.2 Diskretizace numerického modelu kompozitu

K tvorbě sítě byl použit prvek SOLID185 (Ansys, 2010). Jedná se o prvek používaný na trojrozměrné analýzy tuhých těles. Je definován osmi uzly, mající tři stupně volnosti v každém uzlu – posuvy ve směru osy x , y a z . Jeho základní a modifikované tvary jsou uvedeny níže (Obrázek 7.3). Budiž podotknuto, že se v našich výpočtech používá výhradně jeho základní hexaedrická modifikace.



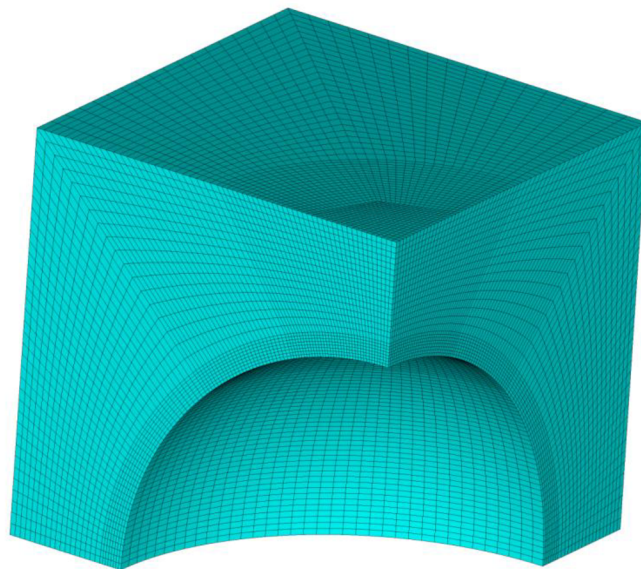
Obrázek 7.3: Základní a modifikované tvary prvku SOLID185.

Tento prvek umožňuje modelovat hyperelasticitu s velkými deformacemi. Dále má možnost simulovat deformace téměř nestlačitelných elastoplastických materiálů a zcela nestlačitelných hyperelastických materiálů. Podporuje dobrou konvergenci díky stabilizaci při nelineárních úlohách. Dalšími vlastnostmi tohoto prvku jsou podpora funkce „úmrtí a oživení“ (Birth and Feath) a jako jediný prostorový prvek podporuje funkci 3D manual rezoning.

Je žádoucí, aby síť konečných prvků byla co nejjemnější a dostatečně rovnoměrná. Nevýhodou hustých sítí je však vysoká náročnost na výpočetní čas a použití hardware. Jeví se tedy jako výhodné použít prvky v základním tvaru - krychle. Důvodem je nižší přesnost tetraedrické modifikace prvku SOLID185. Zároveň je třeba větší počet prvků pro dosažení stejné hustoty sítě. V neposlední řadě – pravidelná, mapovaná síť tvořená hexaedry zvyšuje rychlost konvergence řešení a značně tím zkracuje výpočetní čas.

Aby mohlo být dosaženo kvalitní sítě, je třeba každou výpočtovou geometrii rozdělit na množinu menších objemů mající charakter šestistěnu. Konkrétněji – nejjednodušší uvažovaná modifikace kompozitu SP-SC-17,3 byla rozdělena na 13 menších objemů, vzniklá pravidelná síť je tvořena výhradně hexaedry a má 83 304 elementů a 89 667 uzlů (viz Obrázek 7.4).

Jelikož je částice o několik řádů tužší, z důvodu zkrácení výpočtového času nebyla geometricky vytvořena, nicméně její vliv byl předepsán okrajovou podmínkou.



Obrázek 7.4: Ukázka konečnoprokové sítě na SP-SC-17,3.

7.2.3 Okrajové podmínky

Okrajové podmínky byly předepsány tak, jak již bylo popsáno v kapitole 6.4. Na tři stěny (přesněji řečeno na uzly v těchto stěnách) byly předepsány nulové posuvy a to pouze ve směru jejich normál. Další okrajovou podmínkou byl tzv. coupling, který předepisuje sdružený posuv všech uzlů na vybrané entitě –

v našem případě další dvě stěny elementární buňky. Poslední okrajovou podmínkou je předepsání posuvů na horní stěně elementární buňky. V případě varianty se 17,3% poměrným objemovým množstvím částic byl maximální posuv $u = 0,49$, v případě plnění 42,8 byl maximální posuv $u = 0,19$. Uvedené hodnoty vychází z provedených experimentálních měření.

Vlivy částice jsou ošetřeny předepsáním nulových posuvů na rozhraní mezi částicí a maticí.

7.2.4 Nastavení řešiče

Při numerické analýze kompozitního materiálu bez porušování matrice dochází ke dvěma ze tří možných nelinearit. Jednou z nich je nelineární chování materiálu, jehož popis je založen na hustotě deformační energie. Druhou nelinearitu způsobují velké deformace. Obojí je důsledkem velkých numerických problémů spojených s nestabilitou při řešení. Při velkých přetvořeních navíc dochází i k velké deformaci elementů, jejichž bazové funkce pak nejsou schopny dostatečně přesně popsat složky posuvů v uzlech.

K řešení byla použita úplná Newton-Raphsonova metoda (NROPT,FULL), byly použity velké deformace (NLGEOM=1) a nastaven dostatečný počet substepů (50-150). S výhodou byl použit multiframe restart, který umožňuje při správném nastavení restartovat úlohu z jakéhokoliv předchozího místa, kde řešení konvergovalo, se změnou okrajových podmínek, nastavení řešiče apod.

7.3 Numerické řešení problému

Po tvorbě modelů následovalo samotné numerické řešení za výše popsaných podmínek.

Výsledkové soubory měly řádově desítky gigabajtů a výpočtový čas se pohyboval v řádu desítek hodin na sestavě tvořené procesorem s 8 jádry o taktovací frekvenci 3,2GHz, instalované operační paměti 24GB RAM a vysokorychlostním HDD.

7.3.1 Výsledky numerického modelování pro poměrné objemové množství částic kompozitu 17,3%

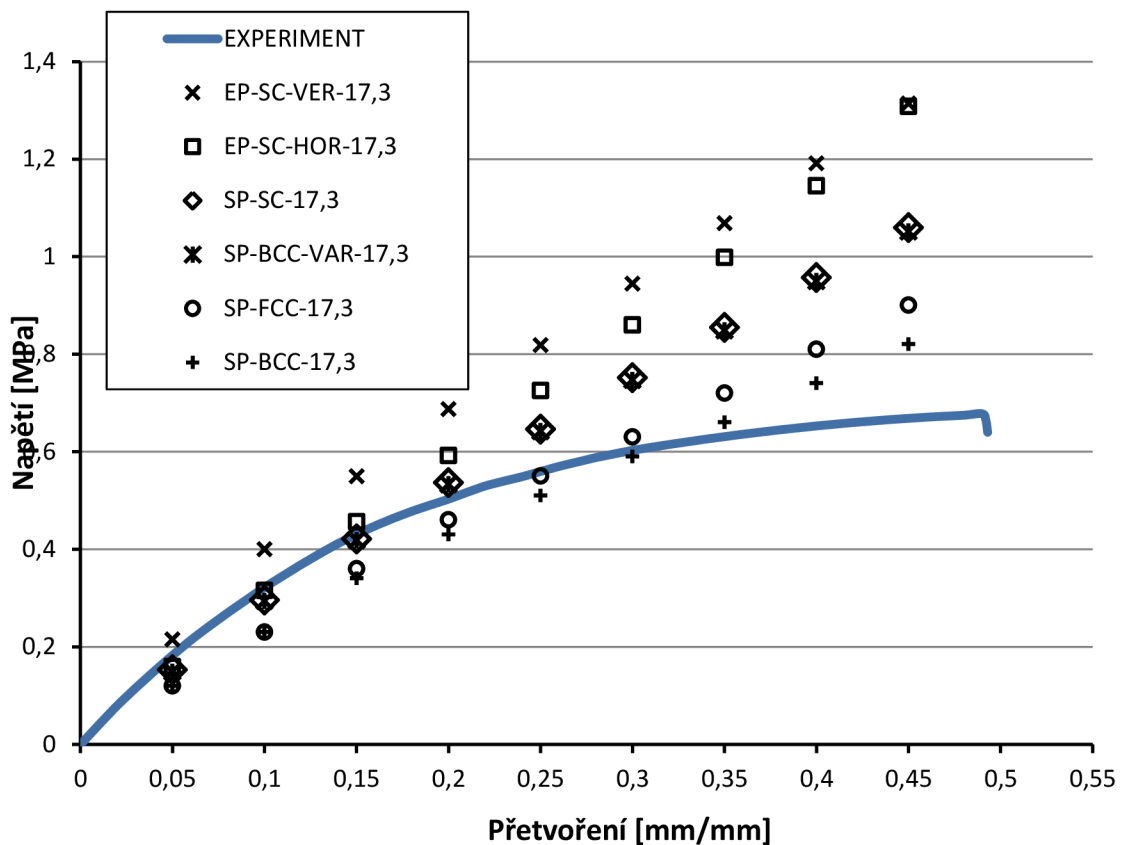
První výsledky byly získány na modelech s poměrným objemovým množstvím částic v kompozitu 17,3%. Porovnávací hodnotou je napětí stanovené na horní stěně buňky. Jejich hodnoty byly pro každou variantu vykresleny do grafu a porovnány s experimentálně zjištěným průběhem napětí reálného kompozitu, viz Obrázek 7.6.

Na první pohled lze konstatovat, že nejlepší shodu s experimentálními daty má model SP-SC-17,3 a SP-BCC-VAR-17,3. Oba dva modely poměrně dobře popisují reálnou zkoušku a to až do makroskopického přetvoření $\varepsilon = 0,18$, od této hodnoty vykazují tuhost vyšší než reálný kompozitový vzorek. Podobnost

výsledků mezi těmito dvěma modely navíc říká, že přítomnost malé částice v modelu SP-BCC-VAR-17,3 nemá v porovnání s velkou částicí v protilehlém rohu skoro žádný vliv.

Modely SP-BCC-17,3 a SP-FCC-17,3 vykazují od počátku menší tuhost, čímž podhodnocují reálnou tahovou zkoušku.

Modely EP-SC-VER-17,3 a EP-SC-HOR-17,3 naopak vykazují v porovnání s experimentálními daty velmi vysokou tuhost již od počátku zatěžování, přičemž EP-SC-HOR-17,3 má dokonce tendenci při vyšších hodnotách makroskopického přetvoření svou tuhost zvyšovat. Vysvětlením je velký rozměr částice v jednom ze směrů. V případě EP-SC-HOR-17,3 zabírá částice ve směru zatěžování 95% délky elementární buňky, tedy veškeré přetvoření matrice se realizuje pouze na 5% původní délky buňky. Jednoduchým propočtem – jestliže provádíme zkoušku do makroskopického $\varepsilon = 0,49$, deformace matrice nad částicí dosahuje skoro 1000%. V případě EP-SC-HOR-17,3 je naopak taková malá tloušťka matrice stlačována.



Obrázek 7.5: Graf porovnávající experimentálně zjištěné napětí částicového kompozitu s plněním 17,3% s numerickým modelováním všech uvažovaných geometrických modifikací.

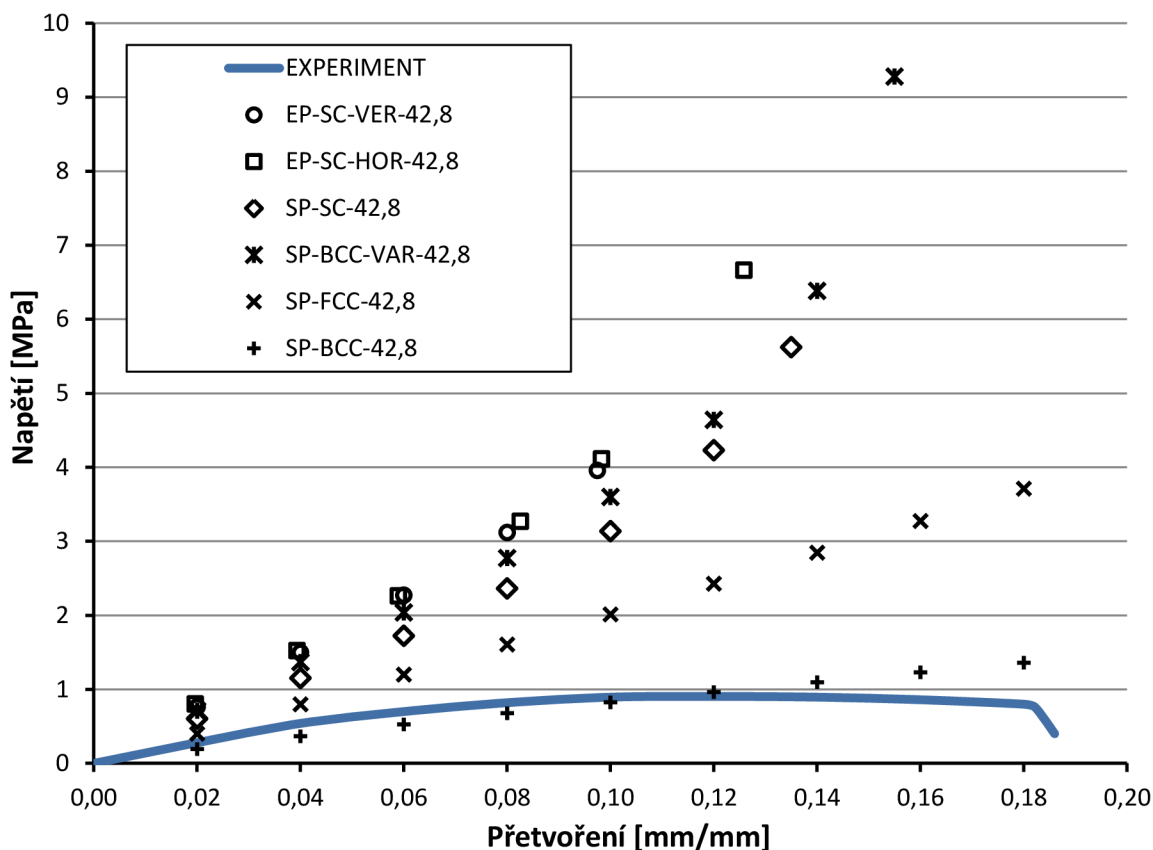
7.3.2 Výsledky numerického modelování pro poměrné objemové množství částic v kompozitu 42,8%.

V případě plnění 42,8%, dosažené výsledky nevycházejí až tak jednoznačně, nicméně trendy zůstaly zachovány jako v předcházejícím případě, viz Obrázek

7.6. Modely SP-SC-42,8, EP-SC-HOR-42,8 a EP-SC-VER-42,8 dokonce nebyly dopočítány do konce. Důvodem byl již zmiňovaný veliký charakteristický rozměr částice, tudíž ve všech třech směrech zbývá málo prostoru pro matici a její případnou deformaci. Nicméně i přesto lze z trendu napětí vyčíst, že EP-SC-HOR-42,8 a EP-SC-VER-42,8 vykazují nejvyšší tuhost.

Dále je opět patrná relativně dobrá shoda mezi SP-SC-42,8 a SP-BCC-VAR-42,8 a to i jejich trend vykazovat zvyšování tuhosti od $\varepsilon = 0,10$.

Modely SP-BCC-42,8 a SP-FCC-42,8 opět výsledky oproti ostatním modelům spíše podhodnocují. Důvodem je vhodnější výpočtová geometrie, kdy je díky relativně menším částicím v buňce dosahováno taky menších lokálních přetvoření, což ve výsledku způsobí, že model vykazuje menší tuhost. Přesto všechno má nejbliže k experimentálním datům SP-BCC-42,8.



Obrázek 7.6: Graf porovnávající experimentálně zjištěné napětí částicového kompozitu s plněním 42,8% s numerickým modelováním všech uvažovaných geometrických modifikací.

7.4 Diskuze dalšího možného postupu.

Přestože byl použit správný model hyperelastického materiálu, modely byly správně navrženy, na základě numerického řešení lze obecně říci, že většina modelů napětí spíše nadhodnocuje. Dá se předpokládat, že důvodem je jejich přílišná idealizace, tedy dokonalá koheze na rozhraní částice a matrice a materiál matrice, který se v uvedených modelech nemůže porušovat a tak dochází

k nereálně vysokým přetvořením matrice, jež neodpovídají maximálním hodnotám zjištěným během tahové zkoušky matrice. Je zřejmé, že pro dosažení dobré shody s experimentálními daty je nutné do modelů implementovat mechanismus porušování matrice. Tímto směrem byly zaměřeny následující simulace.

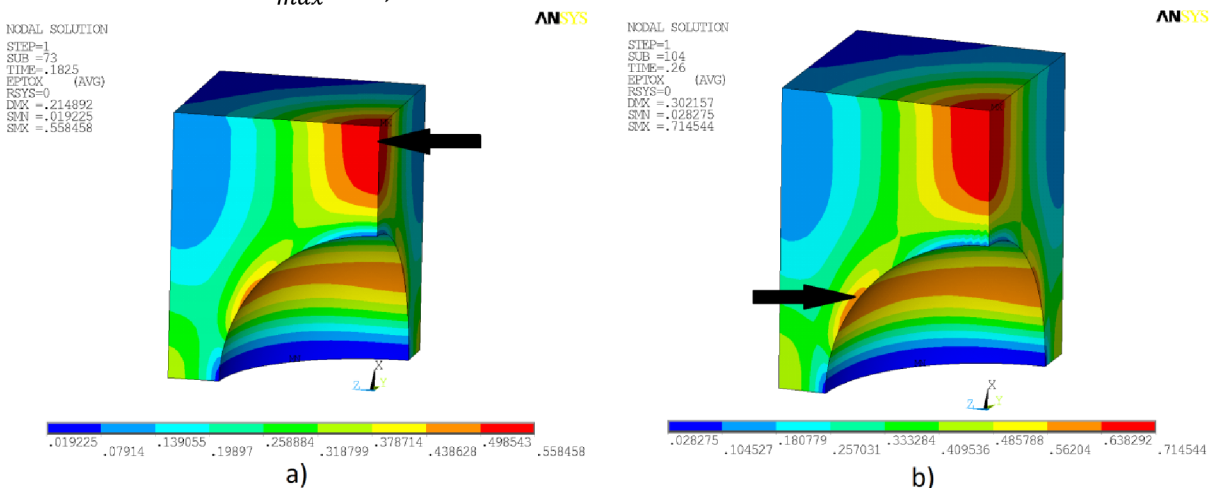
8 Model kompozitu s uvážením porušení matrice

Jak bylo uvedeno v předchozí kapitole, problematika porušování matrice hraje významnou roli při určování makroskopického chování částicového kompozitu zatíženého tahem. Bylo vyvinuto úsilí tento fenomén zanést do numerického výpočtu. Další výpočtové modelování se omezí na modifikaci kompozitu SP-SC-17,3 vzhledem k faktu, že nejlépe popisuje experimentální data pro menší zatížení kompozitu.

8.1 Lokalizace mechanismus porušení

Předchozími analýzami bylo zjištěno, že numerický model zpravidla vykazuje vyšší tuhost, než jakou má skutečný materiál. Příčinou tohoto zjištění je fakt, že při numerickém modelování se v matici objevují velká přetvoření, která fyzikálně neodpovídají vlastnostem materiálu matrice.

Při prohlížení výsledků z analýzy bez porušování kompozitu SP-SC-17,3 můžeme nalézt dva momenty, které by se v reálném materiálu mohly hodnotit jako kritické. První je při makroskopickém přetvoření $\varepsilon = 0,185$, kdy materiál matrice v rohu buňky dosahuje mezního přetvoření $\varepsilon_{max} = 0,56$ (Obrázek 8.1a) zjištěného experimentálně. Dá se předpokládat, že v tomto místě dojde k iniciaci porušování matrice. Druhý takový moment je při makroskopickém přetvoření $\varepsilon = 0,26$ (Obrázek 8.1b). V této fázi zatěžování je dosaženo maximálního přetvoření matrice $\varepsilon_{max} = 0,56$ na rozhraní mezi částicí a maticí.



Obrázek 8.1: Výsledky numerického modelování s vyznačenými body iniciace porušování; vykresleno přetvoření ve směru tažení kompozitu SP-SC-17,3 při makroskopickém přetvoření a) $\varepsilon = 0,185$, b) $\varepsilon = 0,26$.

Cílem dalších numerických analýz bylo zanést proces porušování do numerického modelu kompozitu. Byly použity různé přístupy, které budou představeny v následujících podkapitolách.

8.1.1 Modelování pomocí modelu kohezivní zóny

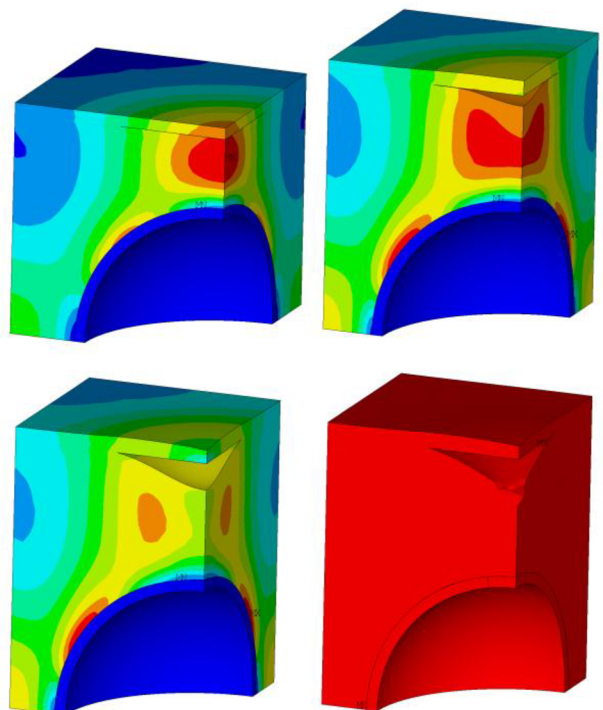
Ztrátu koheze mezi částicí a maticí, případně porušování samotné matrice lze numericky modelovat pomocí kontaktních prvků CONTA174 a TARGE170, které umožňují zavést mezní kohezivní napětí mezi elementy a tak simulovat např. dekohezi mezi maticí a částicí.

Model kohezivní zóny (Ansys, 2010) je nástrojem, umožňující modelovat lom nebo delaminaci podél rozhraní mezi jednotlivými fázemi a hraje důležitou roli při popisu reálného chování vícefázových materiálů. Tento model je popsán kritickou lomovou energií, kterou lze interpretovat jako energii potřebnou k rozdělení dvou fází od sebe. Tento přístup umožňuje modelovat jak delaminaci v normálovém směru, tak i tangenciální skluz.

K určení kohezivní zóny se využívá speciálních modelů materiálu, jež mají dvě varianty:

- CBDD – bilineární chování s lineárním změkčením charakterizovaný maximálním tahovým napětím a maximálním přípustným oddálením jednotlivých složek,
- CBDE - bilineární chování s lineárním změkčením charakterizovaný maximálním tahovým napětím a kritickou energií potřebnou k oddělení jednotlivých složek.

Pomocí této teorie byl vytvořen numerický model, který měl kontaktní prvky mezi částicí a maticí a na tahem zatížené ploše buňky. Zavedením kontaktu do modelu se k předchozím dvěma nelinearitám přidává, třetí. Přestože byly použity obě varianty modelu materiálu kohezivní zóny, byly zjištěny problémy v konvergenci. V momentu oddělení dvou fází dochází k poklesu celkové energie systému. Dochází tak k „vymrštění“ několika uzlů do prostoru. Při postupném zatěžování (viz Obrázek 8.2) narůstá přetvoření v předpokládaném místě, tedy v rohu buňky nad částicí. Při makroskopickém přetvoření $\varepsilon_{makro} = 0,18$ je dosaženo lokálně mezního přetvoření matrice $\varepsilon_{max} = 0,56$, začíná postupné porušování, čímž přetvoření matrice lokálně klesá. Po dosažení



Obrázek 8.2: Výsledky numerického modelování za použití modelu kohezivní zóny; vykresleno přetvoření ve směru tažení kompozitu SP-SC-17.

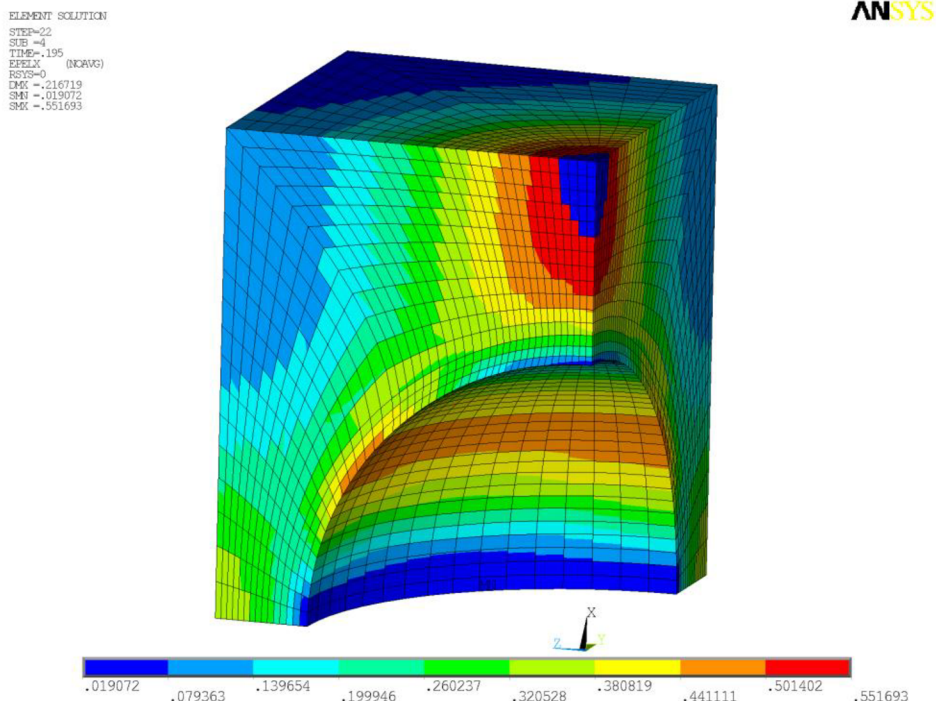
makroskopického přetvoření $\varepsilon_{makro} = 0,25$ se místem porušování stává také rozhraní mezi částicí a matricí, přetvoření matrice nabývá své maximální hodnoty $\varepsilon_{max} = 0,56$. Přes veškerou snahu zde numerické analýzy končí z důvodu chybné formulace elementů.

8.1.2 Modelování pomocí metody Birth and Death

Dalším přístupem modelování, který byl odzkoušen pro simulaci porušení matrice, bylo takzvané umírání elementů. Základní myšlenka je ta, že lze určitý element nechat „umřít“ (ztratí svoji tuhost při dosažení stanovené hodnoty zatížení), čímž pak dále nepřispívá svou tuhostí do zbytku systému. Konkrétně je metoda Birth and Death popsána v manuálu (Ansys, 2010).

V praxi byla tahle myšlenka použita tak, že mezi jednotlivými loadstepy se vždy vyhodnotí, zda některý z elementů matrice nedosáhl mezního přetvoření $\varepsilon_{max} = 0,56$. Jestliže ano, byl automaticky „zabit“, tedy byla u něj nastavena nulová tuhost, čímž je simulován vznik porušení matrice (vznik trhliny). Tím pádem se zatížení, které v předchozím kroku daný element přenášel, distribuovalo do sítě v jeho bezprostředním okolí a vykazované napětí se snížilo.

Problémem je, že touto skokovou změnou se v síti konečných prvků objevila napěťová singularita, způsobená ostrým tvarem vzniklé diskontinuity, která měla za následek divergenci celého řešení. Představu které prvky byly „zabity“ a jak vypadalo rozložení přetvoření krok před nechtěným ukončením výpočtu, lze získat při pohledu na Obrázek 8.3, kde žádný element nepřesahuje maximální dovolené hodnoty $\varepsilon_{max} = 0,56$.



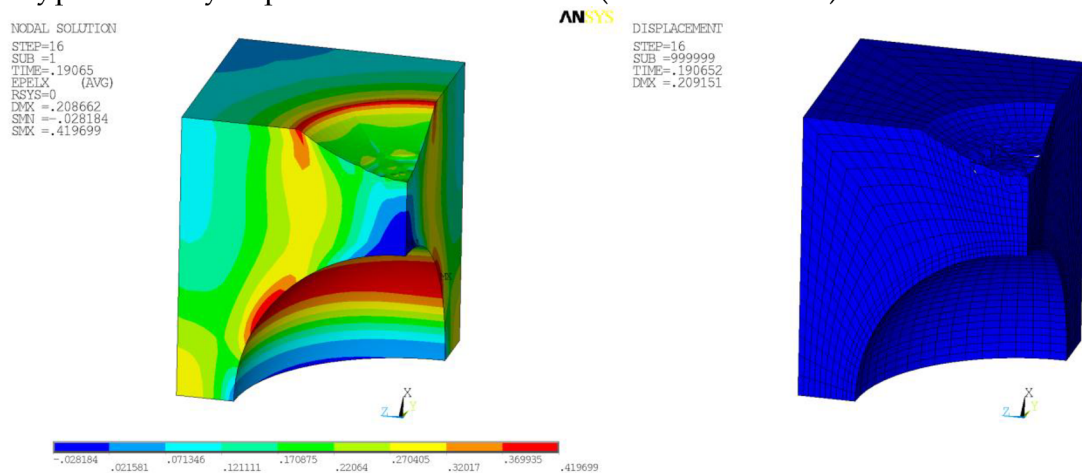
Obrázek 8.3: Výsledky numerické analýzy za použití metody Birth and Death; vykresleno přetvoření ve směru tažení kompozitu SP-SC-17,3 při makroskopickém přetvoření $\varepsilon = 0,195$.

8.1.3 Modelování pomocí řízené změny okrajových podmínek v průběhu výpočtu

Tuto metodu lze řadit mezi inženýrská řešení. Snahou je při analýze dosáhnout takových podmínek, aby se matrice porušovala při dosažení mezního přetvoření $\varepsilon_{max} = 0,56$.

Využívá se předpokladu, podloženého předchozím výpočtem, že porušování matrice začne být realizováno v rohu elementární buňky nad částicí a bude se šířit po její tažené ploše. Začátek tohoto porušování nastává při makroskopickém přetvoření $\varepsilon_{makro} = 0,185$. Vhodnou deformační okrajovou podmínkou se dá tvar vzniklého defektu předepsat. Energeticky nejvýhodnější tvar tohoto defektu je tvar rotačního paraboloidu. Vrchol tohoto paraboloidu byl zjišťován uvolněním takových uzlů, které vykazovaly větší přetvoření než $\varepsilon_{max} = 0,56$ a spustil se výpočet. Přestože úloha zdivergovala po několika substepech, mohla být pomocí jednoho z předchozích zkonvergovaných řešení odečtena poloha vrcholu tohoto rotačního paraboloidu. Poté všem uzlům, podílejících se na porušování, byla po přepočtu v tabulkovém editoru Excel udělena deformační podmínkou pozice tak, aby se co nejvíce blížila tvaru zmiňovaného rotačního paraboloidu. Úloha byla restartována v jednom z kroků ještě před zjišťováním pozice vrcholu paraboloidu a opět spuštěno řešení se změněnými okrajovými podmínkami.

Snahou bylo, aby rozdíl energií mezi tvarem vzniklým předepsáním deformačních podmínek a tvarem při přirozeném deformování byl co nejmenší. Počet uzlů, které měly různé okrajové podmínky, se logicky zvyšoval s postupujícím porušováním a výpočet se stával obtížnější. V určitém momentu už nebylo možno zjišťovat optimální tvar rotačního paraboloidu, jelikož jakýkoliv pokus řešit porušení podle předchozího postupu se stával numericky nemožným a výpočet nikdy neproběhl zcela do konce (viz Obrázek 8.4).



Obrázek 8.4: Výsledky numerické analýzy za použití řízené změny okrajových podmínek v průběhu výpočtu; vykresleno přetvoření ve směru tažení kompozitu SP-SC-17,3 při makroskopickém přetvoření $\varepsilon = 0,19065$ a deformovaný tvar po posledním nezkonvergovaném výpočtu po uvolnění uzlů při $\varepsilon = 0,190652$.

8.1.4 Modelování inženýrským přístupem

Na základě předchozích výpočtů bylo zjištěno, že jakákoliv komplikovanější sofistikovaná metoda řešení problému nese s sebou jistá úskalí, která se i přes značné úsilí nedala překonat. Předcházející zkušenosti vedly k formulaci názoru, že při tak komplikované úloze dělá numerické obtíže jakákoliv skoková změna v energii systému. Touto změnou je však právě porušování matrice, jehož simulace byla kritická pro odhad makroskopického chování kompozitu.

V následujícím přístupu byly tedy dodrženy následující předpoklady:

- vyvarovat se skokových změn energii v systému v průběhu řešení,
- nepřidávat další nelinearity do výpočtu z důvodu zjednodušení úlohy a podpory konvergence,
- vycházet z předpokladů o způsobu porušení matrice.

První dva předpoklady jsou preventivními opatřeními k úspěšnému provedení výpočtu až do konečné hodnoty přetvoření. Základní myšlenkou tohoto přístupu je postupný výpočet v několika následných krocích. Do dosažení makroskopického přetvoření kompozitu $\varepsilon_{makro} = 0,185$ je uvažovaný kompozit zcela bez porušení. Mezi $\varepsilon_{makro} = 0,185$ a $\varepsilon_{makro} = 0,260$ se porušování realizuje výhradně na tažené ploše elementární buňky. Od $\varepsilon_{makro} = 0,260$ je k předešlému porušování nastartován i proces dekoheze mezi částicí a maticí. Podotkněme, že tento poznatek byl podpořen i při řešení úlohy s kohezivní zónou popsané dříve v kapitole 8.1.1. Přestože výpočet neproběhl až do konce, skončil přesně v momentu, kdy má začínat proces dekoheze, tedy při makroskopického přetvoření kompozitu $\varepsilon_{makro} = 0,25$ (při uvažování modelu bez porušování byl tento moment při $\varepsilon_{makro} = 0,26$), kde přetvoření matrice nabývá své maximální hodnoty $\varepsilon_{max} = 0,56$. Může být vyřknut poznatek, že okamžik počátku dekoheze a ani zóna delaminace není výrazně ovlivněna procesem porušování polymeru na horní ploše buňky. Vznikající dekoheze je způsobena vysokými smykovými napětími mezi významně deformovanou maticí a tuhými částicí.

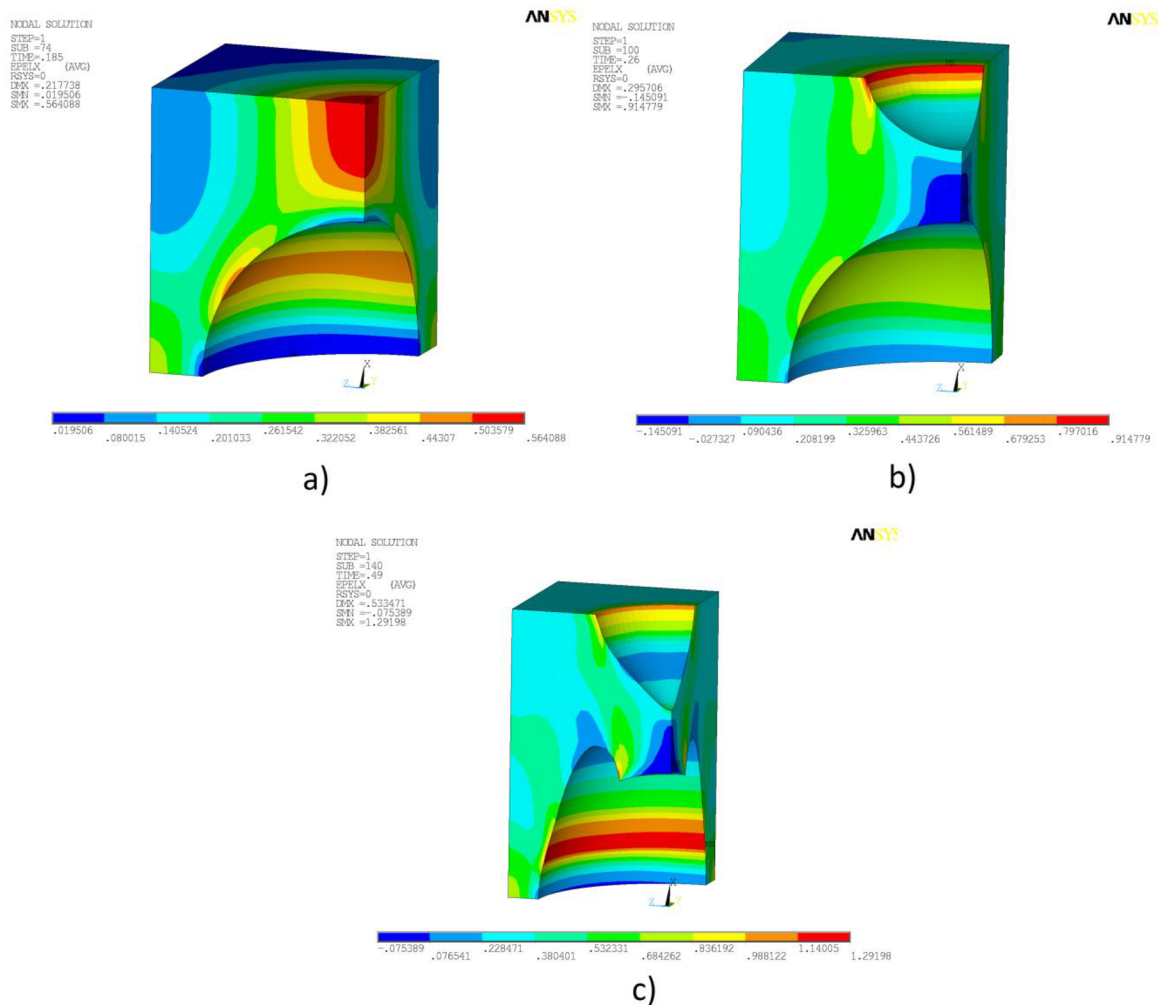
Vzhledem k předchozím poznatkům byl proces porušování rozdělen na tři části a řešen postupně třemi různými numerickými modely, a to:

- za pomoci modelu kompozitu bez porušení matrice, přičemž jeho platnost je pouze při $0 < \varepsilon_{makro} \leq 0,185$ (SP-SC-17,3-A),
- modelem, kde je od začátku uvažováno porušení matrice na tažené ploše nad částicí, jehož platnost je pouze při $0,185 < \varepsilon_{makro} \leq 0,260$ (SP-SC-17,3-B),
- modelem, ve kterém bude od začátku uvažováno porušení matrice na tažené ploše nad částicí interagující s procesem dekoheze mezi maticí

a částicí, přičemž platnost tohoto modelu je pouze pro interval $0,260 < \varepsilon_{makro} \leq 0,49$ (SP-SC-17,3-C).

Dá se předpokládat, že hodnota napětí dosažená v intervalu $0 < \varepsilon_{makro} \leq 0,185$ by měla být platná v celém intervalu. U dalších dvou intervalů, tedy $0,185 < \varepsilon_{makro} \leq 0,260$ a $0,260 < \varepsilon_{makro} \leq 0,49$ by hodnota napětí měla být shodná s experimentem až na jejich koncích. Důvodem je fakt, že uvažujeme porušení matrice už od počátku zatěžování a zóny porušování byly určeny až pro výsledné porušení.

Výsledky numerických analýz jsou zobrazeny níže (viz Obrázek 8.5).



Obrázek 8.5: Výsledky ze tří numerických výpočtů odpovídajících koncům uvažovaných intervalů přetvoření; vykresleno přetvoření ve směru tažení kompozitu SP-SC-17,3; varianty výpočtu a) SP-SC-17,3-A, b) SP-SC-17,3-B, c) SP-SC-17,3-C.

Případné špičky v přetvoření jsou vzniklé ručním vymezením zóny, kde se má materiál porušovat a kde má vzniknout volný povrch. Tento problém se nejvíce projevuje právě na rozhraní matrice a částice, kde je materiál uměle okrajovou podmínkou držen u částice. V reálném kompozitním materiálu by mohlo být

dosaženo ztráty koheze mezi fázemi a polymer by mohl na tomto rozhraní „sklouznout“ po částici.

Dá se předpokládat, že za použití sofistikovanější metody (modelováním za pomoci kontaktních prvků s definovanou kohezní zónou) by v tomto místě vznikl skluz mezi prvky matrice a částice, čímž by se energie uměle koncentrovaná v několika málo elementech redistribuovala do sítě v blízkém okolí. Tím pádem by bylo dosaženo rovnoměrnějšího rozložení přetvoření v okolí částice.

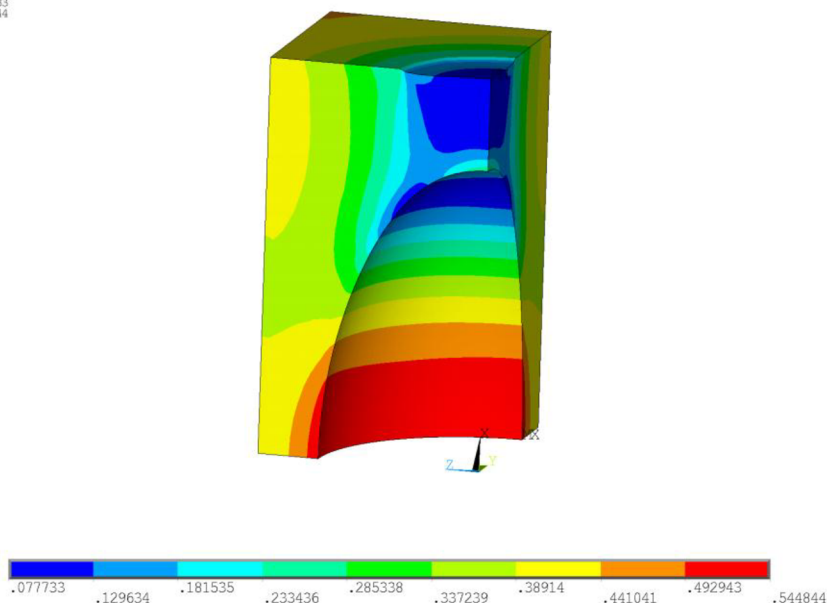
Na dolní straně dekohezní zóny modelu SP-SC-17,3-C překračuje přetvoření materiálu matrice dvojnásobně jeho únosnost. Na horní straně této zóny se navíc díky geometrii deformace matrice společně s vysokými hodnotami přetvoření dá očekávat tendence dalšího šíření dekoheze směrem k vrcholu částice. Na základě tohoto zjištění byl vytvořen ještě jeden numerický model (SP-SC-17,3-D), mající za úkol tento problém alespoň částečně řešit bez použití kontaktních prvků. Dochází u něj k porušování na tažené stěně buňky a k úplné ztrátě koheze mezi částicí a matricí. Výsledky tohoto modelování jsou níže, viz Obrázek 8.6.

```

NODAL SOLUTION
STEP=1
SUB =196
TIME=49
EPELX (AVG)
ESED=0
DMG =.540307
SMN =.077733
SMC =.544844

```

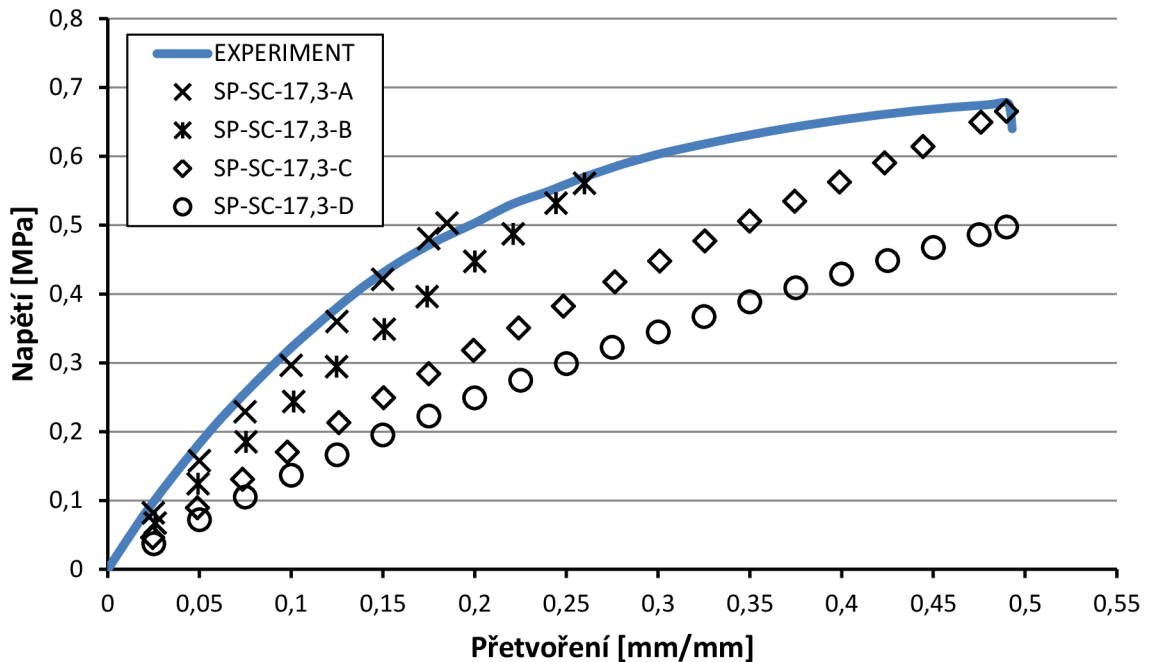
ANSYS



Obrázek 8.6: Výsledky numerického modelování na konci uvažovaného intervalu $\varepsilon = 0,49$; vykresleno přetvoření ve směru tažení kompozitu SP-SC-17,3-D.

Z rozložení přetvoření v okolí částice je patrné, že materiál matrice dosahuje téměř svých mezních hodnot. Tímto zjištěním se můžeme klonit k závěru, že u reálného materiálu může dojít k úplné dekohezi na rozhraní mezi částicí a matricí. Při tak vysokém zatížení pak dojde k porušení sítě řetězců u polymerní matrice v oblasti dolní stěny elementární buňky a případnému šíření trhliny až k sousední částici.

Průběhy napětí u všech čtyř numerických modelů zahrnující postupně oba procesy porušování jsou vyneseny v grafu, viz Obrázek 8.7.



Obrázek 8.7: Graf porovnávající experimentálně zjištěné napětí částicového kompozitu s plněním 17,3% s numerickými výpočty uvažujícími porušování matrice.

Experimentálně zjištěná závislost napětí na přetvoření kompozitu koresponduje s předpokladem, že výsledky numerických analýz budou platné v intervalu $0,185 < \varepsilon_{makro} \leq 0,260$ a na konci dalších dvou intervalů. Dalšímu rozboru bude věnován prostor v následující kapitole.

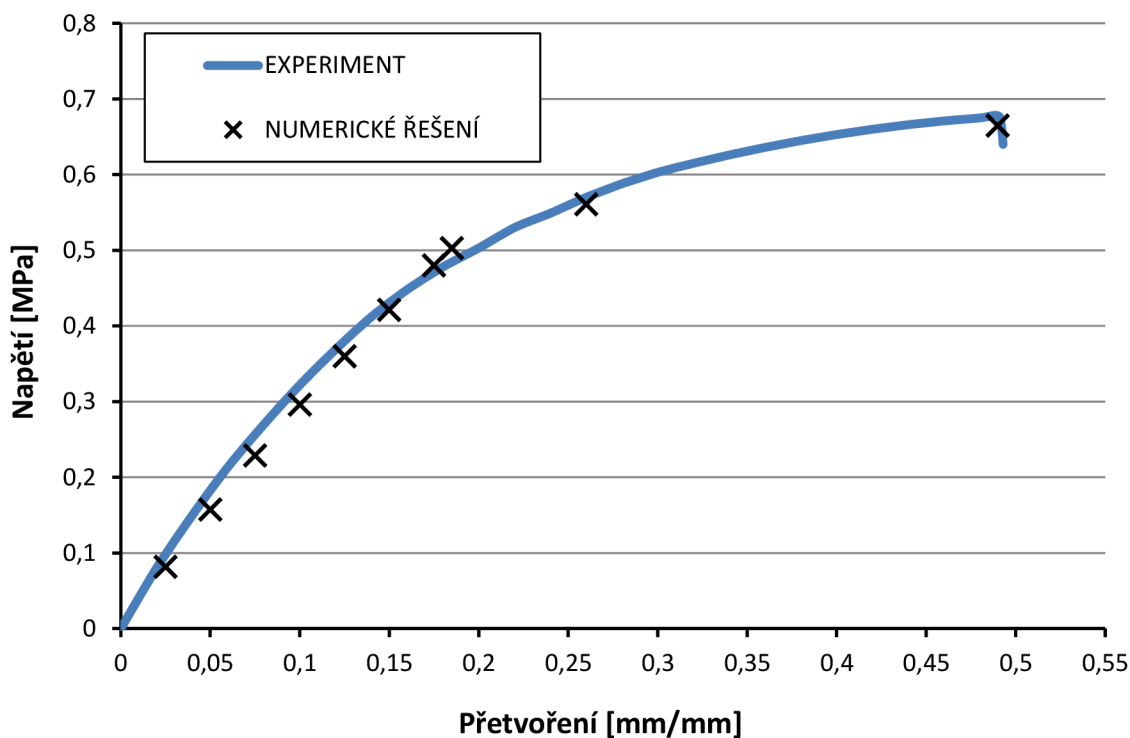
9 Diskuze získaných výsledků

V kapitole 7 byla provedena studie vlivu rozložení částic, jejich tvaru a velikosti na makroskopické chování kompozitu. Obecně lze říci, že čím těsnější uspořádání, tím vyšší je vykazovaná tuhost, při zachování stejného objemového plnění částicemi. Dalším zjištěním je, že jsou-li v kompozitu malé a velké částice, přičemž velikostní rozdíl je několikanásobkem jejich charakteristických rozměrů, lze konstatovat, že malé částice mají jenom nepatrný vliv na změnu mechanických vlastností kompozitu.

Přestože to není na první pohled patrné, z dosažených výsledků lze usuzovat, že je-li materiálu matrice mezi částicemi málo a je-li charakter napjatosti v tomto místě tlakový, výsledný kompozit má tendenci v průběhu zatěžování zvyšovat svoji tuhost.

Co se týče numerické stability výpočtu, bylo vyzorováno, že je-li jeden z charakteristických rozměrů částice větší než 90% jednotkové délky hrany elementární buňky, dochází k numerickým komplikacím při výpočtu.

Kapitola 8 byla věnována problematice porušování vybraného částicového kompozitu (SP-SC-17,3). Jako vhodný se nakonec ukázal inženýrský přístup, díky kterému bylo dosaženo relativně dobrých výsledků při zachování poměrně slušné numerické stability. Spojíme-li dohromady pouze platné intervaly z předchozích výsledků (Obrázek 8.7), dostaneme výslednou makroskopickou závislost kompozitu na vnějším tahovém zatížení (viz Obrázek 9.1).



Obrázek 9.1: Graf porovnávající experimentálně zjištěné makroskopické chování částicového kompozitu s plněním 17,3% s numerickými výpočty a to v jejich platných intervalech.

Výsledky výpočtu jsou založeny na zjednodušení, kdy používáme elementární buňku s předpokladem jejího periodického opakování v materiálu. Přestože se dá tento předpoklad považovat za správný, dosažené výsledky se přímo týkají jen jedné konkrétní částice.

Při zatěžování kompozitu dochází k několika skokům. Při dosažení mezního přetvoření v matici dochází k zprůtrhání polymerních řetězců v síti a dochází k šíření porušování matrice díky akumulované energii a velkému lokálnímu přetvoření. Tím pádem dochází k lokálnímu porušování bez dalšího přidávání energie do systému. Druhý skok je provázen právě ztrátou koheze mezi maticí a částicí. Samotný proces by měl opět z důvodu uvolňování naakumulované energie probíhat částečně samovolně.

Další fyzikální opodstatnění těchto skoků je makroskopické. Numerické výsledky (viz Obrázek 9.1) jsou popisem velmi diskrétní oblasti celého kompozitu, zatímco naměřená data z experimentu se týkají celého zkušebního tělesa. Zkouška, jež byla modelována, není ve skutečnosti ideální. Není bezezbytku dosaženo stoprocentně tahového zatížení (v konfrontaci s naším výpočtem, kde všechny stěny jednotkové elementární buňky zůstávají po deformaci dokonale rovinné). Uspořádání částic v kompozitu není tak dokonalé jako předpokládají vytvořené numerické modely, přičemž jejich počet může být teoreticky nekonečný. A právě tyto tři vlivy (nedokonalé rozmístění, velký počet částic a neideální zatížení) dohromady způsobí, že se porušování nerealizuje v jednom okamžiku v celém objemu materiálu, ale dochází k němu průběžně.

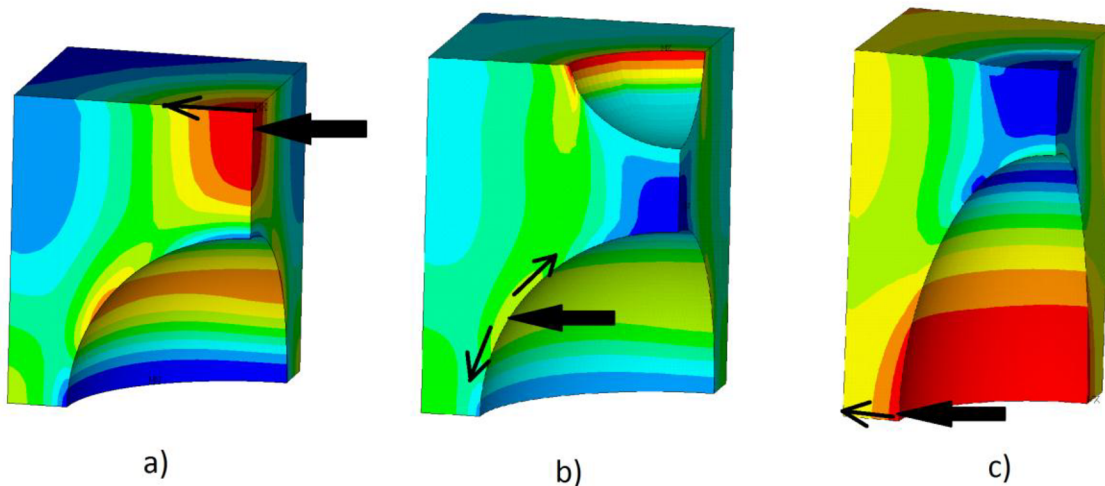
Vzhledem k výsledkům z modelu SP-SC-17,3-D můžeme konstatovat, že byl nalezen mechanismus porušení matrice, který vede k absolutnímu porušení makroskopického vzorku polymeru. Při makroskopickém mezním přetvoření kompozitu bylo téměř dosaženo lokálního mezního přetvoření v matici a to na dolní stěně buňky.

Navíc, na základě rozdílů mezi modely SP-SC-17,3-C a SP-SC-17,3-D lze soudit, že na tuhost celého kompozitního materiálu mají vliv pouze kohezní síly na rozhraní fází. Daný kompozit se poruší vždy při dosažení mezního makroskopického přetvoření kompozitu a to bez ohledu na velikost těchto kohezních sil. Ty mohou mít vliv pouze na velikost defektu v horní části elementární buňky v průběhu zatěžování, nikoliv však na mez pevnosti celého kompozitu.

Mechanismus porušení kompozitu SP-SC-17,3 jako celku se za předpokladu nekonečně velkých kohezních sil bude s nejvyšší pravděpodobností odehrávat podle následujícího scénáře:

- při dosažení makroskopického přetvoření $\varepsilon = 0,185$ začne vznikat defekt v oblasti nad částicí, který se ale v určité fázi samovolně zastaví; makroskopickým projevem je malý pokles tuhosti kompozitu (Obrázek 9.2a);

- při dosažení makroskopického přetvoření $\varepsilon = 0,26$ se začne iniciovat porušování matrice v blízkém okolí částice, přičemž tvar tohoto druhého efektu kopíruje tvar částice do okamžiku, kdy proroste po celém povrchu částice; makroskopickým projevem je velký pokles tuhosti kompozitu (Obrázek 9.2b);
- při dosažení mezního makroskopického přetvoření pro daný kompozit $\varepsilon = 0,49$ se začne šířit trhlina mezi jednotlivými částicemi a vznikne magistrální trhlina; makroskopickým projevem je následný lom kompozitu (Obrázek 9.2c).



Obrázek 9.2: Znázornění scénáře nejpravděpodobnějšího mechanismu porušení kompozitu SP-SC-17,3; zobrazeno přetvoření ve směru zatěžování kompozitu.

10 Závěr

Předložená diplomová práce je zaměřena na stanovení makroskopického chování částicového kompozitu se sesíťovanou polymerní maticí zatíženého tahem. Jako materiál matrice kompozitu slouží sesíťovaný polymethylmetakrylát (PMMA), běžně známý jako „plexisklo“ nebo akrylátové sklo. V kompozitu byly použity vyztužující částice na bázi oxidu hlinitého (Al_2O_3).

Pro lepší pochopení chování polymerů byla vypracována rešerše, která byla zaměřena na historii, fyzikální podstatu a na problematiku spojenou s tímto materiálem. Další část rešeršní práce byla zaměřena na možnosti modelování hyperelastických materiálů.

V praktické části diplomové práce byl zprvu věnován prostor na návrh vhodného hyperelastického modelu materiálu na základě experimentálně zjištěných dat. Jako konstitutivní model byl zvolen Mooney-Rivlinův model hyperelastického materiálu, který z rešeršní práce vyplynul jako pro daný typ úlohy nejvýhodnější. Byly stanoveny potřebné materiálové konstanty a provedeno patričné výpočtové ověření, v rámci něhož bylo testováno, zda se model materiálu chová fyzikálně korektně. Ověření bylo provedeno pomocí numerického modelování. Pro všechny numerické výpočty v předložené práci bylo využito metody konečných prvků implementované v komerčním systému Ansys. Po provedení všech numerických materiálových zkoušek bylo konstatováno, že materiálové konstanty byly správně zvoleny a model je vhodný k modelování materiálu matrice studovaného částicového kompozitu.

Další numerické modelování bylo zaměřeno na makroskopické chování samotného kompozitu zatíženého tahem. Bylo zvoleno celkem šest různých geometrických modelů kompozitních materiálu, které charakterizovaly různé vlastnosti plniva či jeho rozložení, přičemž každý z nich měl dvě různá objemová plnění částicemi, která byla 17,3%, respektive 42,8%. Pro každou variantu byl vytvořen numerický model, který předpokládá dokonalou kohezi mezi částicemi a maticí, a u kterého nebylo bráno v potaz porušování matrice. Výsledky výpočtů získané pro jednotlivé varianty částicového kompozitu byly porovnány s experimentálními daty. Na základě tohoto porovnání mohly být vyřčeny obecné závěry plynoucí ze studia vlivu rozložení částic, jejich velikosti, tvaru a orientace na celkové makroskopické chování kompozitu. Dosažené výsledky naznačily, že během zatěžování kompozitu dochází k porušování matrice. Tento jev pak následně významně ovlivňuje výsledky tahové zkoušky pro přetvoření větší než cca 50% maximálního přetvoření v okamžiku lomu zkušebního tělesa. Bylo tedy nutné zahrnout do numerických modelů také vliv porušování matrice, který hraje významnou roli při určování makroskopických mechanických vlastností studovaného kompozitu

Při modelování porušování matrice kompozitu byly postupně vyzkoušeny čtyři různé přístupy, přičemž jako nejvhodnější se ukázal přístup, který po částech simuloval vznikající porušení matrice. Na tomto základě byly vytvořeny další numerické modely zahrnující veškerou uvažovanou problematiku. Po provedených výpočtech byla konstatována velmi dobrá shoda mezi numerickým modelem a experimentálními daty získanými tahovou zkouškou na reálném kompozitu. Případné nepřesnosti mezi výsledky byly objasněny.

V neposlední řadě byl nastíněn mechanismus porušení kompozitu a objasněn vliv kohezních sil na rozhraní fází na makroskopické chování kompozitního materiálu. Bylo ukázáno, že má prakticky vliv jen na vykazovanou tuhost, nicméně kompozit se poruší vždy při stejném makroskopickém přetvoření. Dále byla stanovena minimální tuhost kompozitu, jaké jde při konfiguraci SP-SC-17,3 dosáhnout.

Uvedený postup lze použít pro odhad makroskopického chování daného typu částicového kompozitu i při jiných objemových plněních a predikovat tak jeho chování. Získané výsledky přispívají k objasnění procesů porušování částicových kompozitních materiálů.

Může být konstatováno, že bylo dosaženo všech vytčených cílů diplomové práce. Závěrem poznamenejme, že některé výsledky dosažené v této práci byly již publikovány v zahraničních vědeckých časopisech.

11 Citovaná literatura

Anslys. 2010. *Anslys Reference Manual V12.1.* 2010.

Ducháček, V. 2006. *Polymery - výroba, vlastnosti, zpracování, použití.* 2. vydání. Praha : Vydavatelství VŠCHT, 2006. str. ISBN 278. 80-7080-617-6.

lung, T. a Grange, M. 1995. Mechanical behaviour of two-phase materials investigated by the finite element method: necessity of three-dimensional modeling. *Materials Science and Engineering A.* 1995, Sv. 20, 1-2, stránky 8-11.

Janiček, P. 2007. *Systémové pojetí vybraných oborů pro techniky - hledání souvislostí.* Brno : Akademické Nakladatelství CERM, 2007. str. 1380. ISBN 978-80-7204-554-9.

LLorca, J. a Segurado, J. 2004. Three-dimensional multiparticle cell simulations of deformation and damage in sphere-reinforced composites. *Materials Science and Engineering A.* 2004, Sv. 365, 1-2, stránky 267-274.

Marur, P. R. 2004. Estimation of effective elastic properties and interface stress concentrations in particulate composites by unit cell methods. *Acta Materialia.* 2004, Sv. 52, 5, stránky 1263-1270.

Máša, B. 2009. *Stanovení efektivních materiálových charakteristik kompozitů na bázi polymerů.* Brno : Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2009. str. 46.

Meissner, V. a Zilvar, V. 1987. *Fyzika polymerů - struktura a vlastnosti polymerních materiálů.* Praha : SNTL -Nakladatelství technické literatury, 1987. str. 308.

Náhlík, L., Hutař, P., Dušková, M., Dušek, K. a Máša, B. Numerical estimation of the macroscopic stress-strain curve of a particulate composite with crosslinked polymer matrix. *Mechanics of Composite Materials.* manuscript v recenzním řízení.

Náhlík, L., Máša, B. a Hutař, P. 2011. Numerical Modeling of Macroscopic Behavior of Particulate Composite with Crosslinked Polymer Matrix. *Key Engineering Materials.* Materials Structure & Micromechanics of Fracture, 2011, Sv. 465, stránky 129-132.

Ogden, R.W. 1997. *Non-linear Elastic Deformations.* New York : Dover Publications, Inc., 1997.

Masarykova univerzita, Pedagogická fakulta, Katedra fyziky. 2006. FyzVlast3. *Fyzikální základy vědy o materiálu.* [Online] 7. Únor 2006.
<http://www.ped.muni.cz/wphy/FyzVla/FMkomplet3.htm>.

Segurado, J., Gonzáles, C. a LLorca, J. 2003. A numerical investigation of the effect of particle clustering on the mechanical properties of composites. *Acta Materialia.* 2003, Sv. 51, 8, stránky 2355-2369.

Sun, C. J., Wu, W., Mahanti, S., Sadeghipour, K., Baran, G. a Debnath, S. 2007. Finite element analysis of elastic property bounds of a composite with randomly distributed particles. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2007, Sv. 38, 1, stránky 80-86.

Sun, C. J., Saffari, P., Ranade, R., Sadeghibour, K., a Baran, G. 2006. Finite element analysis of toughening for a particle-reinforced composite. *Polymer Composite*. 2006, Sv. 27, 4, stránky 360-367.

Treloar, L. R. G. 2005. *The Physics Of Rubber Elasticity*. New York : Oxford University Press, 2005. str. 328. ISBN 0198570279.