

# Reprezentacja cech morfologicznych mikrostruktury w mikromechanicznych modelach materiałów kompozytowych

Rozprawa Doktorska  
mgr inż. Michał Majewski

Promotor  
dr hab. inż. Katarzyna Kowalczyk-Gajewska, prof. IPPT PAN



Instytut Podstawowych Problemów Techniki  
Polskiej Akademii Nauk

02-106 Warszawa, ul. Adolfa Pawińskiego 5B

2018

# Podziękowania

Składam serdeczne podziękowania Promotor Pani dr hab. inż. Katarzynie Kowalczyk-Gajewskiej, profesor IPPT PAN, za opiekę naukową i ogromną pomoc, bez której ta praca by nie powstała.

Dziękuję moim Rodzicom Jolancie i Mirosławowi Majewskim za dobre wychowanie, edukację i wpojenie we mnie samodyscypliny, dzięki której jestem dziś, gdzie jestem.

Składam szczerze podziękowania Pani dr hab. inż. Elżbiecie Pieczyskiej, profesor IPPT PAN, za owocną współpracę i patronat.

Wyrażam również wdzięczność Panu dr. inż. Pawłowi Hołobutowi za generator losowych położeń sfer oraz Panu dr. inż. Michałowi Kursie za udostępnienie algorytmu linearyzacji.

Praca doktorska była częściowo prowadzona w ramach projektów Narodowego Centrum Nauki OPUS: 2013/09/B/ST8/03320, 2016/23/B/ST8/03418 oraz PRELUDIUM 2017/25/N/ST8/01968.

Nade wszystko dziękuję mojej Żonie Annie Majewskiej za niezachwianą wiarę we mnie i Jej bezgraniczne wsparcie w trakcie kilku lat moich studiów doktoranckich.

*Pracę dedykuję Annie Majewskiej – mojej miłości.*

# Streszczenie

Celem rozprawy doktorskiej jest sformułowanie modelu Morfologicznej Reprezentacji Mikrostruktury (MRP) kompozytów zbrojonych cząstkami i ocena jego przydatności do opisanego wpływu upakowania i rozmiaru wtrąceń na efektywne właściwości termiczne i mechaniczne materiału. Pozytywnie zweryfikowane modele mikromechaniczne są skutecznymi narzędziami w projektowaniu nowych materiałów. Szczególnie przydatne są analityczne modele typu MRP, które są efektywne obliczeniowo i jednocześnie uwzględniają dodatkowe cechy mikrostruktury.

Podejście MRP wywodzi się z modelu sfery kompozytowej Hashina i jego modyfikacji do uogólnionego schematu samozgodnego Christensena. Podstawową ideą modelu MRP jest opis mikrostruktury kompozytu za pomocą zestawu odpowiednich morfologicznych wzorców. W rozprawie w kontekście schematu MRP reprezentatywny element objętości jest zastępowany przez dwa wzorce: pierwszy z nich odpowiada uogólnionemu  $(N+1)$ -fazowemu schematowi samozgodnemu  $(N+1)$ -GSC, a drugi jest opisany przez klasyczny schemat samozgodny (SC). Aby opisać efekt upakowania wtrąceń grubość powłoki w pierwszym wzorcu jest określona przez połowę średniej odległości między zewnętrznymi powierzchniami wtrąceń w reprezentatywnym elemencie objętości. Aby uwzględnić efekt rozmiaru wtrąceń w modelu  $(N+1)$ -GSC, wykorzystywane są w pracy dwa podejścia: wprowadza się międzyfazę o grubości niezależnej od promienia cząstki i różnych właściwościach niż podstawowe dwie fazy kompozytu lub zaburza się ciągłość lokalnych pól mechanicznych lub termicznych na granicy między fazami. W celu rozszerzenia modeli mikromechanicznych średniego pola na nieliniowe związki konstytutywne zastosowano przyrostową linearyzację odpowiedzi materiału w kolejnych krokach obliczeniowych. W pracy doktorskiej do oszacowania nieliniowej odpowiedzi materiału w zakresie sprężysto-plastycznym zastosowano przyrostową linearyzację sieczną lub styczną. W celu weryfikacji oszacowań otrzymanych podejściem MRP zastosowano homogenizację numeryczną przeprowadzoną przy pomocy Metody Elementów Skończonych (MES). Wygenerowano reprezentatywne elementy objętości z losowo rozmieszczonymi nienakładającymi się sferycznymi wtręciami i kontrolowanymi wartościami parametrów upakowania i rozmiaru wtrąceń oraz regularne układy położeń wtrąceń.

Rezultaty otrzymane przy wykorzystaniu modelu MRP zostały także porównane z wynikami badań eksperymentalnych. Na podstawie wyników przedstawionych w rozprawie stwierdzono poprawność oszacowań MRP w odniesieniu do wyników MES. Wykazano również dobrą zgodność ilościową przewidywań MRP z rezultatami MES i wynikami eksperymentalnymi.

# Abstract

The aim of the PhD thesis is to formulate and verify the Morphologically Representative Pattern (MRP) model for estimating the effective response of particulate composites and to evaluate its applicability to the description of packing and size effects on their thermal and mechanical properties. Validated micromechanical estimates are efficient tools for designing newly-developed materials. Particularly useful are analytical models like MRP, which are computationally efficient and take into account additional features of microstructures.

The MRP approach originates from the composite sphere Hashin model and its modification into the generalized self-consistent model by Christensen. The basic idea of the MRP approach is the description of a composite as an assemblage of adequate morphological patterns. In this thesis, a Representative Volume Element (RVE) is approximated in the MRP model by two representative patterns: the first one governed by the (N+1)-phase generalized self-consistent scheme (N+1)-GSC and the second one described by the classical self-consistent scheme (SC). To describe the packing effect, the coating thickness in the first pattern is specified by half the mean distance between nearest-neighbour particles in the RVE. To account for the size effect two approaches are applied within the (N+1)-GSC pattern: in the first one an interphase is introduced having a thickness independent of the particle radius and different properties than the basic two phases, while in the second one the continuity of the local mechanical or thermal fields is disturbed at the interface between the composite phases. In the thesis, the extension of mean-field models towards nonlinear constitutive laws is performed by incremental linearization of the material response at computational steps. In the present work, the method of secant or tangent incremental linearization is applied to compute the nonlinear response of a material in the elasto-plastic regime. In the PhD thesis, the predictions of the MRP scheme concerning the effects of packing and size on overall thermal and elasto-plastic composite properties are compared with results of computational homogenization by the Finite Element Method (FEM), performed on RVEs with randomly distributed non-overlapping spherical inclusions and controlled value of the packing parameter. Periodic unit cells with cubic crystal-type arrangements and RVEs with random distributions of particles have been used for verification.

The MRP model was also validated against experimental data. The validity of the MRP estimates with respect to the FEM results was also assessed. Good agreement between the MRP estimates and FEM results as well as experimental outcomes was found.

# Spis treści

<b>Podziękowania</b>	<b>i</b>
<b>Streszczenie</b>	<b>ii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iii</b>
<b>1 Wstęp</b>	<b>3</b>
1.1 Motywacja . . . . .	3
1.2 Aktualny stan wiedzy . . . . .	5
1.3 Zakres i teza pracy doktorskiej . . . . .	8
1.4 Notacja i wykaz skrótów . . . . .	10
<b>2 Model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu (MRP)</b>	<b>13</b>
2.1 Idea modelu MRP . . . . .	13
2.2 Efektywna przewodność cieplna kompozytu . . . . .	20
2.2.1 Uogólnione prawo Fouriera . . . . .	20
2.2.2 Opór cieplny Kapitzy na granicy faz . . . . .	21
2.2.3 Schemat przejścia mikro-makro w modelach mikromechanicznych pola średniego . . . . .	23
2.2.4 Współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu w modelach klasycznych . . . . .	24
2.2.5 Przewidywania modeli mikromechanicznych dla kompozytu dwufazowego z doskonałym połączeniem faz . . . . .	27
2.3 Efektywny tensor sztywności sprężystej kompozytu . . . . .	29
2.3.1 Uogólnione prawo Hooke'a . . . . .	29
2.3.2 Niedoskonały interfejs na granicy faz . . . . .	30
2.3.3 Schemat przejścia mikro-makro w modelach mikromechanicznych pola średniego . . . . .	32
2.3.4 Tensor sztywności sprężystej kompozytu w modelach klasycznych . . . . .	33
2.3.5 Przewidywania modeli mikromechanicznych dla kompozytu dwufazowego z doskonałym połączeniem faz . . . . .	34

2.4	Deformacja sprężysto-plastyczna kompozytu . . . . .	34
2.4.1	Adaptacja modeli średniego pola do opisu nieliniowej odpowiedzi kompozytu	37
2.4.2	Przewidywania modeli mikromechanicznych dla kompozytu dwufazowego z doskonałym połączeniem faz . . . . .	39
<b>3</b>	<b>Homogenizacja numeryczna</b>	<b>41</b>
3.1	Losowe położenie wtrąceń . . . . .	42
3.1.1	Reprezentatywny element objętości (RVE) . . . . .	42
3.1.2	Procedura generacji RVE . . . . .	45
3.2	Układy regularne wtrąceń - komórka jednostkowa . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Weryfikacja zaproponowanych modeli mikromechanicznych</b>	<b>51</b>
4.1	Kompozyt dwufazowy z doskonałym połączeniem faz . . . . .	51
4.2	Limit perkolacji . . . . .	60
4.3	Analiza wpływu upakowania wtrąceń . . . . .	64
4.4	Analiza wpływu rozmiaru wtrąceń . . . . .	70
4.5	Porównanie przewidywań modelu MRP z rezultatami badań doświadczalnych . .	75
<b>5</b>	<b>Podsumowanie i wnioski</b>	<b>89</b>
<b>A</b>	<b>Tensory koncentracji pola gradientu temperatury dla schematów (N+1)-GSC i SC</b>	<b>105</b>
<b>B</b>	<b>Tensory koncentracji odkształcenia dla schematów (N+1)-GSC i SC</b>	<b>108</b>
<b>C</b>	<b>Schemat (N+1)-GSC: niedoskonały interfejs a międzyfaza na granicy faz</b>	<b>112</b>

# Rozdział 1

## Wstęp

### 1.1 Motywacja

Modele mikromechaniczne pozwalają oszacować makroskopowe właściwości materiałów niejednorodnych przy znajomości zjawisk zachodzących w tych materiałach w skali mikro. Pojęcia "mikro" i "makro" mają charakter umowny [1] i tak w przypadku polikryształów wymiarem charakterystycznym jest wymiar ziarna, a w przypadku kompozytów podstawowym parametrem skali jest wymiar ceramicznego wtrącenia. Nowoczesne materiały wyróżniają się obecnością mikrostruktur o skomplikowanej geometrii, które mogą być uzyskane za pomocą różnych metod obróbki (np. mechanicznej lub termicznej). W większości nowoczesnych materiałów konstrukcyjnych (kompozyty o osnowie metalicznej lub polimerowej, stopy i polimery z pamięcią kształtu, meta-materiały czy stopy o wysokiej wytrzymałości właściwej [2]), tworzonych dla przemysłu lotniczego, samochodowego i elektronicznego lub zastosowań biomedycznych, makroskopowa odpowiedź materiału jest istotnie wrażliwa na zmiany zachodzące w jego mikrostrukturze. Mikrostruktury te w znacznym stopniu kształtują pożądane kombinacje właściwości wytwarzanych materiałów, takich jak wysoka wytrzymałość i sztywność w połączeniu z dobrymi parametrami termicznymi. Dlatego przewidywania otrzymywane za pomocą modeli mikromechanicznych są szczególnie istotne dla wielu dziedzin gospodarki i sprawdzone metody oszacowania właściwości makroskopowych są przydatne w procesie projektowania nowoczesnych materiałów.

Obecnemu rozwojowi technologii kształtowania mikrostruktur, czy też nanostruktur [3], towarzyszy rozwój modelowania mikromechanicznego, będącego techniką modelowania z pogranicza inżynierii materiałowej i mechaniki [4]. Jedną z takich technik jest zyskująca na popularności homogenizacja numeryczna. W ostatnich latach jej znaczny rozwój jest związany z rosnącą mocą obliczeniową komputerów oraz rozwojem technik obrazowania mikrostruktury materiału [5]. W wielu przypadkach model numeryczny reprezentatywnego elementu objętości jest tworzony na podstawie skanów tomografii komputerowej materiału niejednorodnego i w rezultacie termomechaniczna analiza MES jest wykonywana na rzeczywistym fragmencie mikrostruktury materiału [6, 7]. W pracy [8] przedstawiono różne metody opisu ilościowego struktur materiałowych.

Alternatywnie w homogenizacji numerycznej nie odwzoruje się rzeczywistej mikrostruktury jeden do jednego, a generuje się równoważną uproszczoną morfologię kompozytu (ang. equivalent microstructure), której makroskopowa odpowiedź zgadza się z efektywną odpowiedzią skomplikowanej oryginalnej mikrostruktury [9]. Oczywiście w homogenizacji numerycznej zamiast MES może być także zastosowana metoda elementów brzegowych, jak np. w pracy [10] do modelowania nanokompozytów. Jednak technika homogenizacji numerycznej ma swoje ograniczenia. Wysoki koszt obliczeniowy, szczególnie dla zagadnień nieliniowych sprawia, że rozważania dotyczą zwykle ograniczonej liczby elementów reprezentatywnych. W związku z tym przeprowadzenie szerokiego studium wpływu parametrów mikrostrukturalnych na makroskopową odpowiedź termomechaniczną materiału jest kłopotliwe ze względu na ograniczoną liczbę elementów reprezentatywnych. Kolejną trudnością związaną z analizą MES jest zapewnienie reprezentatywności rozważanego elementu objętości. Stąd obliczenia przeprowadzane przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej są zwykle kompromisem między kosztem obliczeniowym analizy, a poprawnym odtworzeniem rzeczywistej mikrostruktury materiału [11]. Przykładowo często dla kompozytów używane są uproszczone komórki jednostkowe zawierające pojedyncze wtrącenie. Przy takich uproszczeniach przewaga homogenizacji komputerowej nad analitycznymi modelami mikromechanicznymi jest sporna.

Analityczne modele mikromechaniczne są efektywnym narzędziem projektowania oraz szacowania jakości proponowanych materiałów syntetycznych oraz technik ich wytwarzania, dlatego mogą być stosowane do wstępnej selekcji składu i cech morfologicznych wytwarzanego materiału pod kątem wymagań projektowych [12],[13]. Dodatkowo takie estymatory właściwości mechanicznych mogą być traktowane jako wartości referencyjne właściwe dla materiału idealnego (z idealnym połączeniem między fazami itp.) przy interpretacji wyników badań doświadczalnych. Modele mikromechaniczne są również pomocne w zrozumieniu lokalnych mechanizmów rządzących wpływem cech morfologicznych mikrostruktury na właściwości materiału w skali makro. Ponadto analityczne modele materiałów niejednorodnych ze względu na wysoką efektywność obliczeniową mogą być wykorzystywane jako równania konstytutywne stosowane w punktach całkowania w analizach MES dużych problemów brzegowych [14] i mogą stanowić rozsądną alternatywę dla kosztownych obliczeniowo podejść wieloskalowych typu  $FE^n$  [15]. Niemniej aby zastosowanie modeli analitycznych w punktach całkowania MES mogło konkurować w jakości odtworzenia morfologii mikrostruktury przez homogenizację numeryczną, modele analityczne powinny w sposób efektywny uwzględniać szersze niż obecnie spektrum parametrów mikrostrukturalnych. Opracowanie i weryfikacja tego typu modelu mikromechanicznego uwzględniającego morfologię materiału niejednorodnego jest głównym zadaniem niniejszej pracy doktorskiej. Należy wspomnieć, że alternatywą dla zastosowania mikromechanicznych modeli analitycznych w MES jest skrócenie czasu obliczeń dla podejścia wieloskalowego, np. poprzez zastosowanie hp-adaptacyjnej wersji metody elementów skończonych [16].



## 1.2 Aktualny stan wiedzy

Znajdowanie właściwości efektywnych materiałów niejednorodnych za pomocą modeli mikromechanicznych bazuje na pewnym przybliżeniu ścisłego rozwiązania problemu znajdowania efektywnej makroskopowej odpowiedzi elementu objętości. Zasadniczą sprawą jest sformułowanie schematu przejścia od zagadnienia lokalnego rozkładu pól odkształceń i naprężeń w komponentach materiału niejednorodnego do ich uśrednionych wartości odpowiadających zachowaniu materiału jednorodnego o efektywnych właściwościach. W przypadku określania sztywności materiału najpowszechniejszy schemat przejścia odpowiada "regule mieszanin" stosowanej w inżynierii materiałowej, w której zakłada się jednorodne odkształcenie lub naprężenie w fazach materiału. Bardziej zaawansowane modele mikromechaniczne wykorzystują dostępne w literaturze rozwiązania analityczne, takie jak rozwiązanie Eshelby'ego dla elipsoidalnej inkluzji w nieskończonej macierzy [17] czy podobne rozwiązanie autorstwa Herve i Zaoui dla sferycznej inkluzji kompozytowej o N-fazach [18]. W swojej pracy Eshelby założył liniową sprężystość dla osnowy, zaś w rozwiązaniu autorstwa Herve i Zaoui występuje dodatkowo założenie izotropii faz. Koncepcja pojedynczej niejednorodności w sprężystej macierzy stała się podstawą licznych modeli pola średniego. Jako przykładowe można tu wymienić modele Mori-Tanaka (MT), samo-zgodny (SC), uogólniony samozgodny (GSC), podwójnej inkluzji (DI), różnicowy i przyrostowy, [1]. Niektóre wymienione schematy np. samozgodny i jego uogólnienie zostały także wykorzystane w algorytmach homogenizacji numerycznej za pomocą MES, np. [19].

Klasyczne modele mikromechaniczne nie uwzględniają wpływu rozmiaru wtrąceń ani ich stopnia upakowania w materiale kompozytowym w wyznaczaniu efektywnych właściwości kompozytu i biorą pod uwagę jedynie ich udziały objętościowe oraz ewentualnie kształt elipsoidalnej inkluzji. Większość modeli zwykle napotyka na problemy przy określaniu właściwości efektywnych materiałów przy wysokich udziałach objętościowych wtrąceń lub dużym kontraście właściwości faz [20]. Jakość oszacowań uzyskanych za pomocą modeli MT lub SC spada wraz ze wzrostem udziału objętościowego faz lub wraz z powiększającym się kontrastem między właściwościami komponentów materiału niejednorodnego [20, 21]. Wynika to z uśrednionego opisu wzajemnego oddziaływania poszczególnych komponentów np. poprzez oddziaływanie z efektywnym medium w modelu samo-zgodnym.

Wpływ upakowania lub rozmiaru wtrąceń na makroskopową odpowiedź materiału jest obserwowany np. w zależności naprężenia płynięcia (flow stress) od rozmiaru ziarna w polikryształach (zależność Hall-Petch) [22], lub w relacji między różnymi makroskopowymi właściwościami kompozytów w zakresie sprężystym a absolutnym rozmiarem wtrąceń [23, 24]. Wpływ upakowania można zaobserwować w przypadku oddziaływania aglomeratów na pogarszanie się odporności na pękanie (fracture toughness) kompozytu w zależności od orientacji skupiska wtrąceń w materiale [25]. W pracy [26] wykazano relację między wzrostem wytrzymałości kompozytu a spadkiem odległości między wtręciami. Wymienione przykłady wpływu upakowania wtrąceń są ściśle związane z rozkładem pola naprężenia oraz pola odkształcenia w materiale heterogenicznym.

Kiedy rozmiar komponentów maleje to rola granic międzyfazowych wzrasta. W kompozytach ceramiczno-metalowych ze względu na reakcje chemiczne między ceramiką a metaliczną osnową właściwości międzyfazy są inne niż dwóch podstawowych komponentów kompozytu: ceramiki i zastosowanego metalu [24]. Często w strefie granic pomiędzy fazami dochodzi do zapoczątkowania degradacji materiału heterogenicznego np. pęknięcia, zaburzenia połączenia na granicy komponentów lub ewolucji uszkodzenia. Dlatego uwzględnianie właściwości strefy międzyfazami jest istotne dla prawidłowego modelowania mikromechanicznego makroskopowej odpowiedzi kompozytu.

Generalnie można wyróżnić dwa podejścia, mające na celu uwzględnienie wspomnianego wpływu rozmiaru cząstek na właściwości mechaniczne materiałów heterogenicznych. W pierwszym podejściu wprowadzona jest dodatkowa faza (międzyfaza) jako powłoka (płaszcz) o skończonej grubości wokół wtrąceń w kompozytach z metaliczną osnową lub wokół ziaren w polikryształach [18, 28, 29]. Klasyczne podejścia pola średniego są zmodyfikowane przez specyfikację dodatkowego tensora koncentracji opisującego zależność pól tensorowych naprężenie-odkształcenie w płaszczu od odpowiednich wielkości makroskopowych. Warto podkreślić, że efekt rozmiaru ziarna lub wtrąceń jest realizowany poprzez zadanie innych parametrów międzyfazy w stosunku do pozostałych faz kompozytu. Podejście tego typu opiera się na uogólnionym modelu samozgodnym (generalized self-consistent model) zaproponowanym przez Christensena i Lo [30], w którym sfera kompozytowa jest osadzona w nieskończonym medium. Niejednorodność składa się ze sfer o wspólnym środku o parametrach materiałowych odpowiednio fazy wtrącenia i osnowy oraz promieniu ustalonym przez udział objętościowy tych faz. W swojej najprostszej wersji uogólniony model samozgodny nadal nie opisuje efektu skali. Herve i Zaoui [18] w swojej pracy rozszerzyli analityczne rozwiązanie dwupowłokowej sfery do sfery z  $N$ -płaszczami. Przybliżone rozwiązania dla elipsoidalnego wtrącenia złożonego z dwóch powłok są zaproponowane w [28, 31].

Innym podejściem jest zastosowanie niedoskonałej dwuwymiarowej warstwy brzegowej położonej na granicy faz (imperfect interface) np. [32],[33]. Właściwości dwuwymiarowej warstwy brzegowej (interfejsu) są inne niż właściwości komponentów materiału heterogenicznego. W zależności od wariantu modelu wprowadzona dwuwymiarowa warstwa może lub nie zapewniać spełnienie równania równowagi dla naprężeń oraz zgodność odkształceń na granicy faz.

Trudności związane z oszacowaniem efektywnej odpowiedzi materiału niejednorodnego dla gęstego upakowania cząstek lub z powodu zaniedbania rozkładu cząstek można także rozwiązać poprzez rozważenie bezpośrednich interakcji między niejednorodnościami, jak to ma miejsce w wariacie  $n$ -site teorii średniego pola [34, 35]. Tego rodzaju metodologia jest zastosowana w modelu klastrowym zaproponowanym przez Molinari'ego i El Moudena [36] w celu oszacowania właściwości sprężystych. W modelu klastrowym wybierana jest podstawowa objętość, w kształcie sześciennego kostki, zawierająca skończoną liczbę wtrąceń (inkluzji), która jest następnie reprodukowana periodycznie w celu wypełnienia całej przestrzeni. Do każdego wtrącenia w RVE jest przypisana sfera o określonym promieniu. Następnie, uwzględniane są tylko bezpośrednie interakcje między inkluzjami w danym klastrze. Zaprezentowane podejście dopuszcza elipsoidalne

wtrącenia i materiały wielofazowe. W artykule [37] model klastrowy został rozszerzony o przypadek niejednorodności z płaszcami, a w publikacji [38] autorzy za pomocą klastrów oszacowali przewodność cieplną kompozytu. W pracach [39, 40] zbadano, stosując technikę homogenizacji numerycznej, zależność efektywnych właściwości kompozytu od rozkładu cząstek w kompozycie dwufazowym wykorzystując elementy reprezentatywne, w których część cząstek występuje w postaci skupisk. Chociaż wyniki wskazują, że niejednorodny rozkład cząstek ma nieznaczny wpływ na makroskopowe właściwości sprężyste i plastyczne kompozytu, to wykazano, że koncentracja wtrąceń prowadzi do dużo większego prawdopodobieństwa rozwoju uszkodzenia w okolicach aglomeratów cząstek.

Jak już wspomniano klasyczne modele pola średniego typu wtrącenie-osnowa nie uwzględniają przestrzennej dystrybucji wtrąceń. W 1976 roku Kroner i Koch [41] zaproponowali opis wpływu rozkładu komponentów materiału na ogólne właściwości kompozytu poprzez dolne i górne ograniczenia wariacyjne z  $n$ -punktowymi funkcjami korelacji modułów sprężystych faz. Ponte Castaneda i Wills [42], opierając się na wcześniejszym artykule Willisa z 1977 [43], sformułowali oszacowania właściwości efektywnych bazujące na dwu-punktowych funkcjach korelacji dla sprężystego kompozytu zbrojonego inkluzjami o dowolnym kształcie rozproszonymi wewnątrz próbki zgodnie z rozkładem o symetrii elipsoidalnej. Dodatkowo autorzy w swojej pracy przedstawili ilościowe oszacowania dla elipsoidalnych wtrąceń.

Uwzględnienie dodatkowych parametrów mikrostrukturalnych takich jak: upakowanie cząstek, rozmiar wtrąceń albo właściwości obszaru między fazami, z jednoczesnym zachowaniem prostych do aplikacji sformułowań jest możliwe przy zastosowaniu koncepcji reprezentacji cech morfologicznych mikrostruktury za pomocą wzorców (Morphology-based Representative Pattern approach, skrót MRP) [44] [45]. Pomysł podejścia MRP bazuje na idei sfery kompozytowej wprowadzonej przez Hashina [46]. Marcadon i inni [45], wykorzystując wspomniane rozwiązanie Hashina, sformułowali koncepcję MRP dla sprężystego i izotropowego kompozytu o ciągłej osnowie oraz rozproszonych izotropowo sferycznych wtrąceniach z jednakowymi promieniami. W artykule autorzy uwzględnili średnią odległość między wtrąceniami oraz, poprzez wprowadzenie dodatkowej fazy na granicy komponentów kompozytu, wpływ efektu rozmiaru cząstek. Obecne w literaturze zastosowania koncepcji MRP dotyczą w znakomitej większości materiałów izotropowych, zakresu liniowej sprężystości lub liniowej lepkości oraz, w szczególności, sferycznego kształtu wtrąceń, [47], [48].

W rozprawie zaadoptowano tę koncepcję do oszacowania wpływu upakowania i rozmiaru wtrąceń oraz jakości interfejsu na granicy faz na efektywny współczynnik przewodzenia ciepła materiałów kompozytowych. Analityczne modele dostępne w literaturze w zagadnieniu przewodzenia ciepła najczęściej uwzględniają jakość połączenia na granicy faz dwufazowych kompozytów poprzez opór cieplny Kapitzy [83] lub obecność trzeciej fazy w formie płaszcza wokół fazy rozproszonej np. [104],[105]. Nie znaleziono w literaturze zastosowania podejścia reprezentacji cech morfologicznych mikrostruktury za pomocą wzorców w zagadnieniu przewodzenia ciepła. Równania modelu MRP w kontekście oszacowania makroskopowego współczynnika przewo-

nia ciepła w niniejszej pracy doktorskiej zostały wyprowadzone przez autora.

Podejście MRP może być szczególnie użyteczne w modelowaniu nieliniowej odpowiedzi materiałów heterogenicznych, szczególnie kompozytów ceramiczno-metalowych ze sprężysto-plastyczną osnową i sprężystymi wtrąceniami ceramicznymi. W takich kompozytach w zakresie zaawansowanego płynięcia plastycznego należy rozwiązać problem odpowiadający przypadkowi sztywnych inkluzji w podatnej macierzy. Dodatkowo zastosowanie podejścia MRP w kontekście nieliniowego zachowania materiałów dla zakresu sprężysto-plastycznego wymaga poprawnej linearyzacji stosowanych relacji konstytutywnych. W przypadku modeli średniego pola, które nie uwzględniają efektów skali i przestrzennego rozłożenia komponentów (np. MT, SC, DI), w literaturze można znaleźć następujące propozycje mające swe źródło w schemacie przyrostowym zaproponowanym przez Hilla w 1965 roku: linearyzacja przyrostowa styczna, sieczna, nieprzyrostowa styczna, asymptotyczna styczna, addytywna styczna oraz sekwencyjna, [49],[50]. Poprawność poszczególnych schematów linearyzacji jest przynajmniej częściowo zweryfikowana przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej MES, [49],[51].

W ramach pracy doktorskiej rozszerzono podejście MRP na oszacowanie sprężysto-plastycznych właściwości kompozytów poprzez przyjęcie koncepcji przyrostowej linearyzacji nieliniowych relacji konstytutywnych zaproponowanej przez Hilla [53]. Taka linearyzacja jest uzyskiwana przez zastosowanie modułu stycznego lub siecznego materiału [53], [54]. Dodatkowo, zastosowane w MRP schematy GSC lub (N+1)-GSC oraz tensory koncentracji, wymagają izotropizacji tensora modułów stycznych lub siecznych na każdym kroku obliczeniowym, który to tensor w ogólności jest anizotropowy [35]. Właściwy wybór zarówno metody linearyzacji jak i procedury izotropizacji można zweryfikować numerycznie, stosując bezpośrednio procedury generowania mikrostruktury przedstawione w artykule [55]. Na podstawie przedstawionej w artykule analizy można wnioskować, że oszacowania MRP, dzięki uwzględnieniu upakowania cząstek, mogą poprawić klasyczne modele mikromechaniczne w przypadkach sztywnych wtrąceń w podatnej osnowie, zwłaszcza w zagadnieniu odpowiedzi nieliniowej kompozytów.

### 1.3 Zakres i teza pracy doktorskiej

W pracy doktorskiej został sformułowany i zweryfikowany mikromechaniczny model materiałów kompozytowych uwzględniający wpływ rozmiaru wtrąceń i ich upakowania oraz efekt granicy międzyfazowej na makroskopowe liniowe i nieliniowe właściwości materiału. Prace badawcze obejmowały następujące zadania:

1. Opracowanie mikromechanicznego modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu do wyznaczenia makroskopowego współczynnika przewodzenia ciepła i właściwości sprężystych.
2. Sformułowanie i aplikacja modeli mikromechanicznych, w tym modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu, do określenia odpowiedzi kompozytu w zakresie

sprężysto-plastycznym.

3. Opracowanie metodologii weryfikacji analitycznych modeli mikromechanicznych przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej i metody elementów skończonych.
4. Wykonanie studium wpływu cech mikrostruktury materiału takich jak:
  - upakowanie wtrąceń,
  - rozmiar wtrąceń,
  - parametry granicy międzyfazowej,

na makroskopowe właściwości kompozytu:

- współczynnik przewodzenia ciepła,
- moduły sprężystości,
- odpowiedź sprężysto-plastyczną.

Zawartość kolejnych rozdziałów rozprawy jest następująca. Rozdział drugi dotyczy opisu modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. W rozdziale tym przedstawiono ideę podejścia reprezentacji mikrostruktury kompozytu za pomocą wzorców, a w kolejnych podrozdziałach zawarto sformułowanie modeli mikromechanicznych pola średniego, z wyszczególnieniem podejścia morfologicznej reprezentacji kompozytu, dla właściwości termicznych jak i sprężystych kompozytów. Na końcu rozdziału drugiego opisano metodę linearyzacji przyrostowej służącej oszacowaniu nieliniowej sprężysto-plastycznej odpowiedzi kompozytu, zastosowaną w niniejszej rozprawie. Rozdział trzeci dotyczy homogenizacji numerycznej za pomocą metody elementów skończonych. W tym rozdziale poruszono kwestię reprezentatywności generowanych mikrostruktur kompozytów oraz opisano procedurę ich generacji. Weryfikacja oszacowań modeli mikromechanicznych, przeprowadzona przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej, została zaprezentowana w rozdziale czwartym. Każdy z wypunktowanych aspektów mikrostruktury przedyskutowano w osobnych podrozdziałach. Dodatkowo w tym rozdziale wykonano walidację modelu morfologicznej reprezentacji kompozytu w oparciu o badania doświadczalne. Rozdział piąty zawiera podsumowanie najważniejszych rezultatów i płynące z nich wnioski.

### **Teza pracy doktorskiej.**

Przedstawione w rozprawie wyniki pozwoliły wykazać następującą tezę:

*Model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu jest efektywny obliczeniowo i pozwala poprawnie opisać wpływ rozmiaru i przestrzennego upakowania wtrąceń oraz efekt granicy międzyfazowej na makroskopową przewodność cieplną oraz sprężysto-plastyczną odpowiedź materiału kompozytowego. Homogenizacja numeryczna jest istotnym narzędziem do weryfikacji sformułowanych analitycznych modeli mikromechanicznych.*

## 1.4 Notacja i wykaz skrótów

Wartości fizyczne w pracy są w jednostkach SI wypisanych poniżej. W rozprawie zastosowano tzw. notację absolutną, gdzie:

- wektory oznaczane są pogrubioną małą literą alfabetu łacińskiego, np.  $\mathbf{n}$ ,
- tensory drugiego rzędu oznaczane są pogrubioną dużą literą alfabetu łacińskiego, np.  $\mathbf{L}$  lub pogrubioną literą alfabetu greckiego, np.  $\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}$ ,
- tensory czwartego rzędu oznaczane dużymi, pustymi literami alfabetu łacińskiego, np.  $\mathbb{M}$ ,
- iloczyn tensorowy oznaczany symbolem  $\otimes$ , np.  $\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}$ ,
- pełne nasunięcie tensorów i iloczyn skalarny oznaczane symbolem  $\cdot$ , np.  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}$ ,
- proste nasunięcie tensorów – brak symbolu, np.  $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U}$ ,
- tensor jednostkowy drugiego rzędu oznaczony jest literą  $\mathbf{I}$ , zaś czwartego rzędu  $\mathbb{I}$ .

Oznaczenia faz materiału heterogenicznego:

- m – osnowa (ang. matrix),
- inc – wtrącenie (ang. inclusion),
- int – międzyfaza, faza kompozytu między wtrąceniem, a osnową (ang. interphase).

Oznaczenia parametrów materiałowych:

- $k$  – współczynnik przewodzenia ciepła (w lit. oznacza również przewodność cieplną)(ang. thermal conductivity)  $[\frac{\text{W}}{\text{mK}}]$ ,
- $\alpha = 1/\beta$  – opór cieplny Kapitzy na granicy faz (ang. Kapitza's thermal resistance)  $[\frac{\text{m}^2\text{K}}{\text{W}}]$ ,
- $\beta = 1/\alpha$  – przewodność cieplna Kapitzy na granicy faz (ang. Kapitza's thermal conductance)  $[\frac{\text{W}}{\text{m}^2\text{K}}]$ ,
- $K$  – moduł objętościowy (w lit. współczynnik sprężystości objętościowej)(ang. bulk modulus) [Pa],
- $G$  – moduł ścinania (w lit. moduł odkształcalności postaciowej)(ang. shear modulus) [Pa],
- $\eta$  – składowa normalna tensora podatnego interfejsu (ang. normal component of compliance layer)  $[\frac{\text{Pa}}{\text{m}}]$ ,
- $\mu$  – składowa styczna tensora podatnego interfejsu (ang. tangent component of compliance layer)  $[\frac{\text{Pa}}{\text{m}}]$ .

Oznaczenia związane z geometrią mikrostruktury:

- $V$  – objętość (ang. volume),
- $f$  – udział objętościowy (ang. volume fraction),
- $t_{\text{int}}$  – grubość międzyfazy (ang. thickness of interphase) [ $m$ ],
- $R_{\text{inc}}$  – promień sferycznych wtrąceń (ang. radius of spherical inclusion) [ $m$ ],
- $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  – parametr rozmiaru wtrąceń (ang. size parameter),
- $\bar{\lambda}$  – średnia z minimalnych odległości między zewnętrznymi powierzchniami wtrąceń [ $m$ ],
- $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  – parametr upakowania wtrąceń (ang. packing parameter).

Oznaczenia związane z prawem Fouriera:

- $\mathbf{q}$  – gęstość strumienia ciepła [ $\frac{W}{m^2}$ ],
- $\mathcal{K}$  – tensor drugiego rzędu przewodności cieplnej [ $\frac{W}{mK}$ ],
- $\nabla T$  – gradient temperatury [ $\frac{K}{m}$ ].

W rozprawie wielokrotnie używane są skróty, zawsze wyjaśnione w miejscu pierwszego pojawienia się. Dla wygody czytelnika wykaz skrótów używanych w pracy zebrano poniżej:

- MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu (ang. Morphologically Representative Pattern approach),
- SC – schemat samozgodny (ang. Self-Consistent),
- (N+1)-GSC – (N+1)-fazowy uogólniony schemat samozgodny (ang. (N+1)-phase General Self-Consistent),
- GSC – uogólniony schemat samozgodny (ang. General Self-Consistent) odpowiadający modelowi trójfazowemu 3-GSC,
- MT – model Mori-Tanaka,
- CS – model sfery kompozytowej (ang. Composite Sphere),
- DD – model rozproszonych wtrąceń (ang. Dilute Distribution),
- HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-Shtrikmana,
- HEM – jednorodny ośrodek o efektywnych właściwościach (ang. Homogeneous Equivalent Medium),

- RVE – reprezentatywny element objętości (ang. Representative Volume Element),
- SVE – statystyczny element objętości (ang. Statistical Volume Element),
- BC – warunki brzegowe w metodzie elementów skończonych (ang. Boundary Condition),
- DEM – metoda elementów dyskretnych (ang. Discrete Element Method),
- RSA – losowe dodawanie sekwencyjne (ang. Random Sequential Addition).

Układy krystalograficzne (Rys. 3.4):

- RC – prosty (ang. Regular Cubic),
- BCC – ściennie centrowany (ang. Body-Centered Cubic),
- FCC – przestrzennie centrowany (ang. Face Centered Cubic).

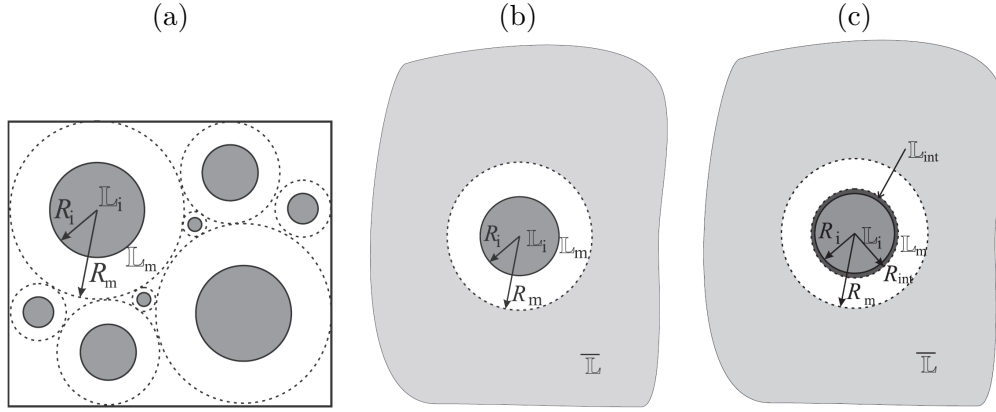


## Rozdział 2

# Model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu (MRP)

### 2.1 Idea modelu MRP

Model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu (ang. Morphologically Representative Pattern, skrót MRP) [44, 45] bazuje na mikromechanicznym modelu sfery kompozytowej (ang. Composite Sphere, skrót CS), sformułowanym w pracy [46] dla materiału dwufazowego, i jego dalszej modyfikacji do uogólnionego schematu samozgodnego (ang. Generalized Self-Consistent, skrót GSC) z prac [30, 21]. W modelu sfery kompozytowej przyjmuje się, że reprezentatywna objętość składa się z wtrąceń osadzonych w ciągłej fazie osnowy w sposób schematycznie pokazany na Rys.2.1.a. Do każdego wtrącenia jest przypisany powiązany z nim region osnowy w obszarze sfery. Współczynnik opisujący wielkość sfery wewnętrznej względem sfery zewnętrznej jest określony poprzez udział objętościowy wtrąceń w kompozycie, tj.  $R_{inc}^3/R_m^3 \equiv f_{inc}$ . Dodatkowo zakłada się gradację promieni sfer kompozytowych do nieskończenie małych, umożliwiając wypełnienie całej reprezentatywnej objętości. W modelu uogólnionym samozgodnym GSC, zwanym również modelem trójfazowym 3-GSC, rozpatrywana jest pojedyncza sfera kompozytowa, która podobnie jak niejednorodność w schemacie samozgodnym (schemat wewnętrznie-zgodny, ang. Self-Consistent, skrót SC), jest osadzona w homogenicznym ośrodku o efektywnych właściwościach Rys.2.1.b. W kolejnych latach model GSC został rozszerzony ze schematu trójfazowego do schematu (N+1)-fazowego w pracy [18] (skrót (N+1)-GSC), a w szczególności do modelu czterofazowego 4-GSC pokazanego schematycznie na Rys.2.1.c.



Rysunek 2.1: Schemat (a) sfery kompozytowej (CS) (b) uogólniony schemat samozgodny, nazywany także modelem trójfazowym (GSC lub 3-GSC) (c) model czterofazowy (4-GSC).  $\mathbb{L}_{inc}$ ,  $\mathbb{L}_m$ ,  $\mathbb{L}_{int}$ ,  $\bar{\mathbb{L}}$  - tensor sprężystości fazy wtrąceń, osnowy, warstwy międzyfazy oraz efektywnego medium;  $R_{inc}$ ,  $R_{int}$ ,  $R_m$  - promień sferycznego wtrącenia, wtrącenia z płaszczem międzyfazy oraz sfery kompozytowej.

W podejściu MRP modele (N+1)-GSC oraz SC są wykorzystywane w celu opisanie efektów upakowania i rozmiaru wtrąceń w heterogenicznym materiale złożonym z ciągłej osnowy zbrojonej cząstkami. Sam model SC lub 3-GSC nie opisuje efektu upakowania lub efektu skali. Model MRP jest sformułowany dla wielofazowego kompozytu.

Podejście MRP postuluje zastąpienie reprezentatywnego elementu objętości (ang. Representative Volume Element, skrót RVE) z pewnymi cechami morfologicznymi (np. wielkość wtrąceń) przez  $M$  reprezentatywnych wzorców (ang. representative pattern)  $\alpha$  z określonym udziałem objętościowym  $c_\alpha$  w stosunku do całkowitej objętości  $V$  elementu reprezentatywnego, gdzie

$$c_\alpha = \frac{V_\alpha}{V}, \quad \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha = 1. \quad (2.1)$$

W każdym wzorcu określony jest udział objętościowy  $f_k^\alpha$  fazy  $k$  we wzorcu  $\alpha$ :

$$f_k^\alpha = \frac{V_\alpha^k}{V_\alpha}, \quad \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha f_k^\alpha = f_k, \quad (2.2)$$

gdzie  $f_k$  jest udziałem objętościowym fazy  $k$  w reprezentatywnej objętości  $V$ :

$$f_k = \frac{V_k}{V}, \quad \sum_{k=1}^N f_k = 1, \quad (2.3)$$

zaś  $N$  jest liczbą faz w kompozycie.

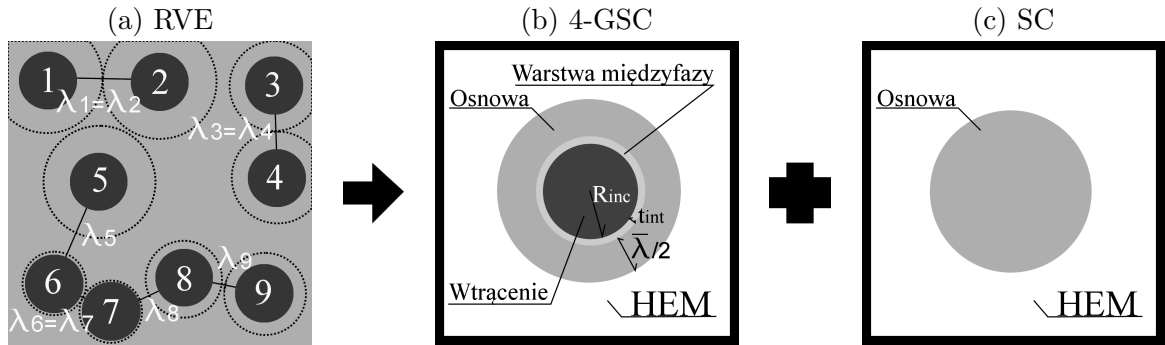
Dla zobrazowania podejścia MRP założmy przykładowy RVE dwufazowego kompozytu zbrojonego jednakowymi sferycznymi wtrąceniami (Rys. 2.2.a). Mikrostruktura kompozytu jest reprezentowana w MRP przez dwa wzorce (Rys. 2.2.b i c) i umożliwia zbadanie efektów upakowania oraz wielkości wtrąceń:

- aby uwzględnić **efekt upakowania** w pierwszym wzorcu, do opisu którego wykorzystywany jest schemat czterofazowego uogólnionego schematu samozgodnego 4-GSC, znajduje się płaszcza o parametrach materiałowych osnowy kompozytu. Grubość płaszcza jest określona przez **średnią z odległości każdego wtrącenia do jego najbliższego sąsiada** i wynosi  $\bar{\lambda}/2$ , przykładowo na Rys.2.2.a  $\bar{\lambda} = \sum_{k=1}^9 \lambda_k/9$ . Wartość  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  w literaturze [45, 55] jest nazwana parametrem upakowania. Drugi wzorec jest opisywany schematem samozgodnym SC ze sferyczną inkluzją o parametrach materiałowych osnowy. W 2-wzorcowym podejściu MRP udział objętościowy wzorca 4-GSC i SC jest kolejno równy

$$c = c_{4\text{-GSC}} = f_{\text{inc}} \left( 1 + \frac{\bar{\lambda}}{2R_{\text{inc}}} \right)^3, \quad c_{\text{SC}} = 1 - c, \quad (2.4)$$

gdzie  $f_{\text{inc}}$  – udział objętościowy wtrąceń,  $R_{\text{inc}}$  – promień wtrąceń,  $\bar{\lambda}$  – średnia z minimalnych odległości między zewnętrznymi powierzchniami wtrąceń,  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  – parametr upakowania wtrąceń.

- aby uwzględnić **efekt rozmiaru wtrąceń** w pierwszym wzorcu 4-GSC wprowadzona jest **warstwa międzyfazy o grubości  $t_{\text{int}}$  niezależnej od promienia wtrącenia oraz o innych parametrach materiałowych niż pozostałe fazy**. Przy założeniu stałej grubości międzyfazy  $t_{\text{int}} = \text{const.}$ , wraz ze spadkiem średnicy wtrąceń wpływ warstwy międzyfazy na efektywne właściwości kompozytu wzrasta. Wartość  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  w literaturze [45, 55] jest nazwana parametrem rozmiaru wtrąceń.

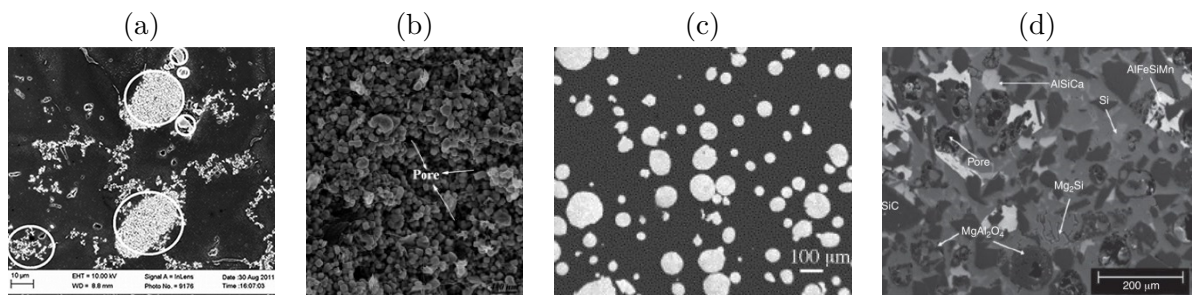


Rysunek 2.2: Mikrostruktura dwufazowego kompozytu, zbrojonego sferycznymi wtrąceniami  $k = 1, \dots, 9$  o jednakowych promieniach  $R_{\text{inc}}$ , jest reprezentowana dwoma wzorcami 4-GSC i SC w modelu MRP.  $\lambda_k$  – odległość między wtrąceniem  $k$  i jego najbliższym sąsiadem,  $\bar{\lambda}$  – średnia wartość  $\lambda_k$  po wszystkich wtrąceniach w reprezentatywnej objętości, dla danego przykładu  $\bar{\lambda} = \sum_{k=1}^9 \lambda_k/9$ ,  $t_{\text{int}}$  – grubość międzyfazy, HEM – jednorodny ośrodek o efektywnych właściwościach (ang. Homogeneous Equivalent Medium).

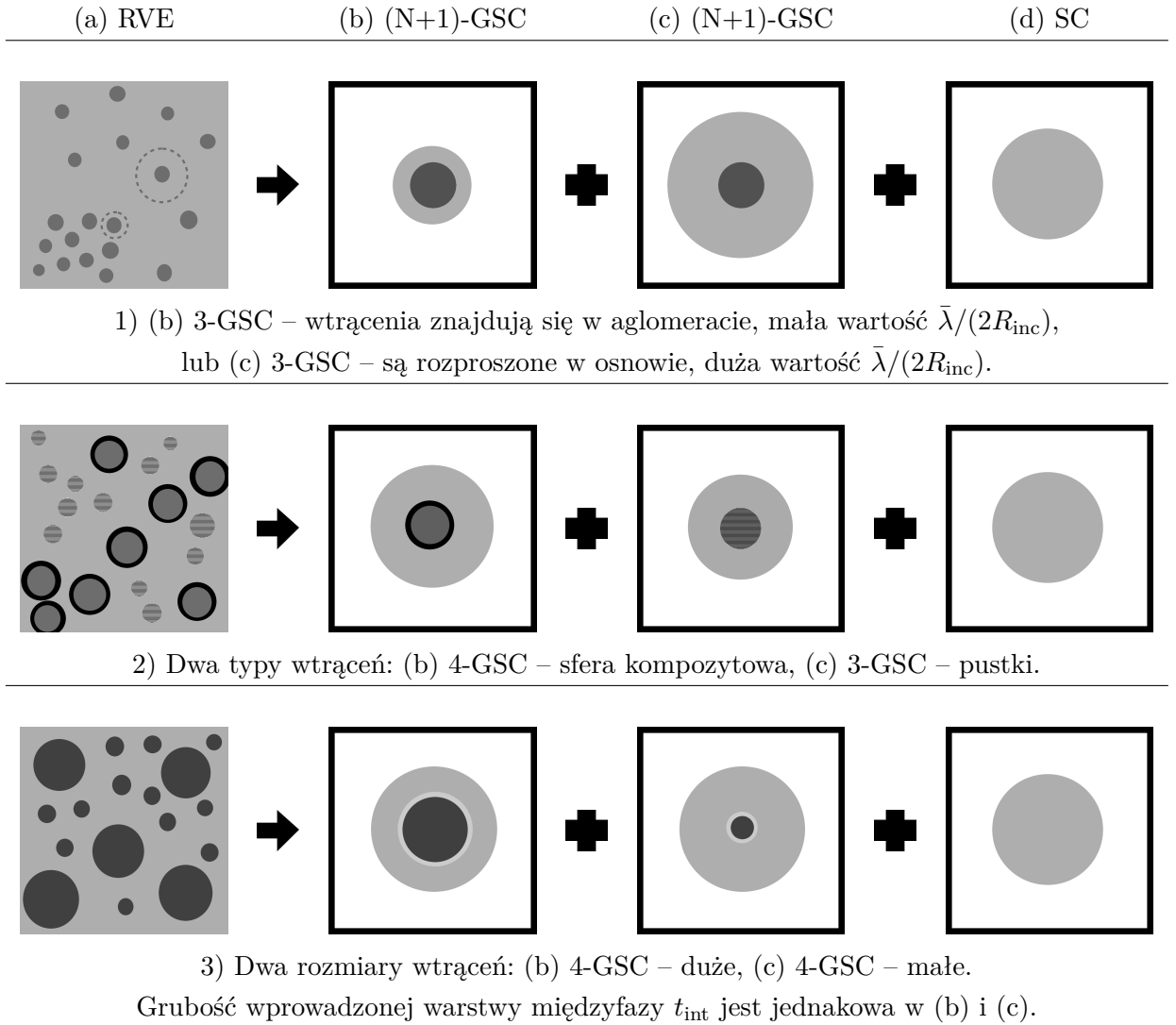
Dominujące cechy mikrostruktury materiału heterogenicznego mają reprezentację we wzorcach podejścia MRP. Na Rys.2.3 zaadoptowano obrazy mikrostruktur kompozytów kolejno z

prac [76, 77, 78, 79]:

- **Rys.2.3.a** - kompozyt o osnowie metalicznej zbrojonej nanowtrąceniami (ang. Metal Matrix Nanocomposites, skrót MMNCs) - obraz zaadaptowano z pracy [76], w której na podstawie dwuwymiarowych mikroskopowych obrazów kompozytu zbadano możliwość przewidywania dystrybucji 3D wtrąceń w objętości materiału niejednorodnego. W kompozycie MMNCs część wtrąceń jest zgrupowanych w klastrach, dlatego w reprezentacji morfologii mikrostruktury MMNCs za pomocą modelu MRP należy uwzględnić upakowanie wtrąceń poprzez parametr upakowania  $\bar{\lambda}/R_{inc}$  (Rys.2.4.1).
- **Rys.2.3.b** - kompozyt o osnowie BaTiO<sub>3</sub>-poli (fluorek winylidenu) zbrojony nanocząstkami Ag z płaszczem warstwy SiO<sub>2</sub> - obraz zaadaptowano z pracy [77], w której zbadano mikrostrukturę i właściwości dielektrycznego kompozytu Ag-SiO<sub>2</sub>-BaTiO<sub>3</sub>-poli. W mikrostrukturze kompozytu zidentyfikowano pory, których wpływ na efektywne parametry kompozytu należy w modelu uwzględnić osobno (Rys.2.4.2).
- **Rys.2.3.c** - kompozyt o osnowie Al zbrojony 25% wtrąceniami TiAl - obraz zaadaptowano z pracy [78], w której zbadano wpływ przeciskania przez kanał kątowy na parametry mikrostruktury i właściwości mechaniczne kompozytu Al-TiAl. Morfologia kompozytu Al-TiAl charakteryzuje się różną wielkością wtrąceń TiAl, których wpływ w modelu MRP jest uwzględniony poprzez parametr rozmiaru wtrąceń - dodanie warstwy międzyfazy  $t_{int}$  (Rys.2.4.3).
- **Rys.2.3.d** - kompozyt hybrydowy o osnowie Al - obraz zaadaptowano z pracy przeglądowej [79]. W mikrostrukturze kompozytu (Rys.2.3.d) zidentyfikowano wtrącenia z: Si, SiC, AlSiCa, AlFeSiMn, Mg<sub>2</sub>Si, MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> oraz pory.



Rysunek 2.3: Obrazy mikrostruktur kompozytów zaadaptowane kolejno z prac [76, 77, 78, 79]. (a) Kompozyt o osnowie metalicznej zbrojonej nanowtrąceniami gromadzącymi się w klastrach. (b) Kompozyt o osnowie BaTiO<sub>3</sub>-poli (fluorek winylidenu) zbrojony nanocząstkami Ag z płaszczem warstwy SiO<sub>2</sub> oraz z porami. (c) Kompozyt o osnowie Al zbrojony 25% wtrąceniami TiAl o różnej wielkości. (d) Kompozyt hybrydowy o osnowie Al, zidentyfikowano wtrącenia z: Si, SiC, AlSiCa, AlFeSiMn, Mg<sub>2</sub>Si, MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> oraz pory.

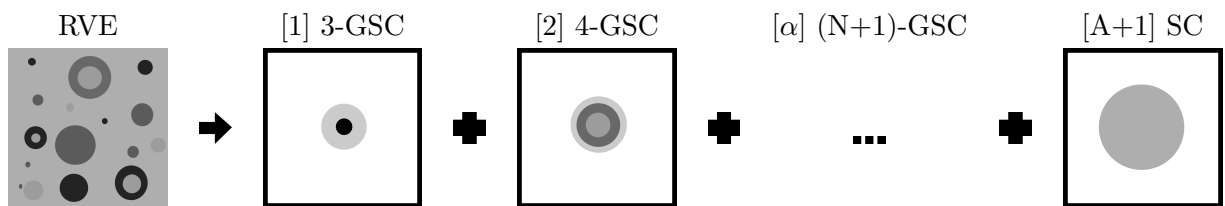


Rysunek 2.4: Uproszczone mikrostruktury materiałów heterogenicznych (kolumna 'a' na podstawie 2.3.a-c) wraz z propozycją rozbicia na wzorce w podejściu morfologicznej reprezentacji kompozytu MRP. (1) Kompozyt dwufazowy dwóch typów rozkładów: w klastrze lub rozproszonych (Rys.2.3.a). (2) Kompozyt trójfazowy z pustkami, zbrojony wtrąceniami z płaszczem (Rys.2.3.b). (3) Kompozyt dwufazowy z wyraźnym rozróżnieniem dużych i małych wtrąceń (Rys.2.3.c). RVE – reprezentatywny element objętości, 4-GSC – model czterofazowy, 3-GSC – model trójfazowy (tożsamy z GSC), SC – model samozgodny.

Propozycje schematycznego ujęcia przykładów Rys.2.3.a-c za pomocą reprezentatywnych wzorców w ramach podejścia MRP zaprezentowano na Rys.2.4.1-3. W tak uproszczonych rzeczywistych mikrostrukturach wybór charakterystycznych cech morfologii kompozytu jest intuicyjny - w każdym z przypadków można wyróżnić dwie kategorie wtrąceń. Przypadek 2.4.1 – w dwufazowym kompozycie część wtrąceń jest skupiona w aglomeracie, zaś pozostałe są rozproszo-

ne w RVE. Konsekwentnie zatem należy w modelu MRP rozróżnić wpływ wtrąceń w klastrze, których parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  ma małą wartość, oraz wtrąceń rozdystrybuowanych równomiernie po objętości RVE (parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  ma dużą wartość). Kolejny przykład 2.4.2 – kompozyt trójfazowy z porami, w którym wtrącenia mają płaszcz. Naturalnym podziałem morfologii kompozytu na wzorce MRP będzie podział ze względu na zbrojenie oraz pustki. Ostatni przykład 2.4.3 – kompozyt dwufazowy zbrojony dużymi i małymi wtrąceniami. W modelu MRP wielkość wtrąceń jest uwzględniona przez arbitralne wprowadzenie warstwy międzyfazy o grubości  $t_{\text{int}}$  niezależnej od wielkości wtrąceń.

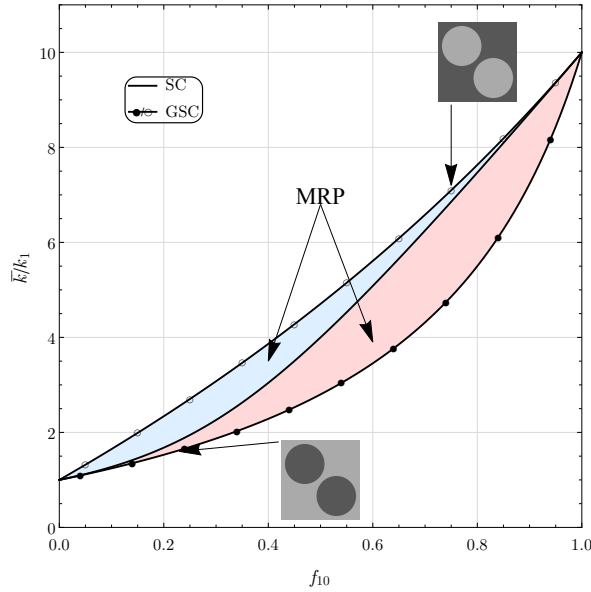
Jednak nie zawsze wybór cech charakterystycznych mikrostruktury jest oczywisty. Mikrostruktura kompozytu hybrydowego o osnowie Al pokazana na Rys.2.3.d jest przykładem kompozytu o skomplikowanej morfologii mikrostruktury. Schematycznie pokazano na Rys.2.5 taki kompozyt, który składa się z ciągłego materiału osnowy i różnych materiałów użytych do zbrojenia. Wtrącenia różnią się wielkością i niektóre mają formę sfer kompozytowych. Dla tak skomplikowanych przypadków można wyróżnić dwa graniczne podejścia: uśrednić parametry fizyczne i geometryczne wtrąceń przyjmując za reprezentację morfologii kompozytu dwa wzorce (jak na Rys.2.2), lub każde wtrącenie  $k$  uwzględniać poprzez osobny wzorec  $\alpha$  reprezentujący kompozyt za pomocą  $A+1$  wzorców (jak na Rys.2.5).



Rysunek 2.5: Mikrostruktura RVE, będąca uproszczeniem przykładu Rys.2.3.d, jest zamodelowana za pomocą całkowitego rozbicia morfologii kompozytu na wzorce w podejściu MRP. Każdemu wtrąceniu  $k = 1, \dots, A$  przypisany jest wzorec (N+1)-GSC: 4 lub 3 fazowy, z płaszczem osnowy  $\lambda_k/2$  odpowiednim dla danego wtrącenia  $k$ . Przy takim podejściu RVE jest rozbity na  $A+1$  wzorców w modelu MRP.

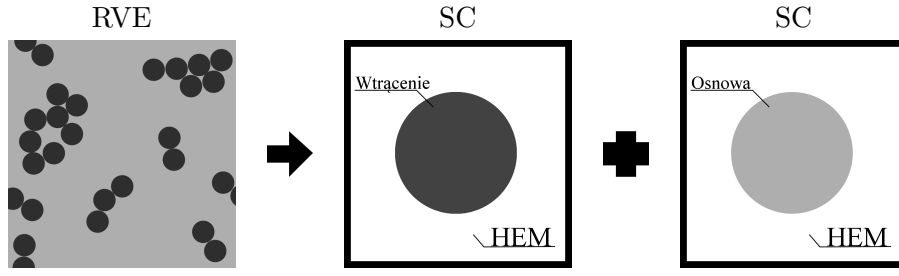
Łatwo zauważyć, że dla dwufazowego kompozytu bez uwzględniania efektu wielkości wtrąceń, czyli bez wprowadzania warstwy międzyfazy ( $t_{\text{int}} = 0$  w Rys. 2.2.b), przewidywania MRP efektywnych parametrów materiałowych wypełnią przestrzeń między schematem GSC (równoznacznym z 3-GSC) a SC (Rys. 2.6). Załóżmy kompozyt dwufazowy (faza dobrze i słabo przewodząca ciepło, kolejno współczynnik przewodzenia ciepła  $k_{10} = 10$  i  $k_1 = 1$ ) w dwóch konfiguracjach: słabo przewodząca osnowa zbrojona dobrze przewodzącymi wtrąceniami i odwrotnie. Na Rys.2.6 zaprezentowano oszacowania efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  uzyskane dla dwóch przypadków konfiguracji kompozytu w funkcji udziału objętościowego fazy dobrze przewodzącej  $f_{10}$ , która jest zbrojeniem kompozytu (przypadek dobrze przewodzących wtrąceń  $k_{\text{inc}} = k_{10} = 10$ ) lub osnową kompozytu (przypadek słabo przewodzących wtrąceń

$k_{\text{inc}} = k_1 = 1$ ). To niestandardowe zaprezentowanie rezultatów pozwala zobrazować, które modele mikromechaniczne są czułe na wybór ciągłej osnowy pomiędzy fazami o  $k_{10} = 10$  lub  $k_1 = 1$ . Na Rys.2.6 widać różnicę przewidywań modelu GSC w zależności od układu kompozytu, podczas gdy schemat samozgodny SC nie rozróżnia w przewidywaniach fazy ciągłej osnowy i fazy rozproszonych wtrąceń. W zależności od konfiguracji kompozytu wyniki modelu MRP spełniają zależności:  $SC \geq MRP \geq GSC$  – przypadek dobrze przewodzących wtrąceń,  $GSC \geq MRP \geq SC$  – przypadek słabo przewodzących wtrąceń.

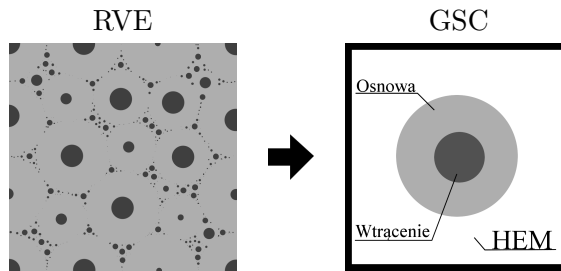


Rysunek 2.6: Stosunek efektywnego przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  do współczynnika przewodzenia ciepła fazy słabo przewodzącej  $k_1 = 1$  vs. udział objętościowy fazy dobrze przewodzącej  $f_{10}$  o  $k_{10} = 10$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji kompozytu. Dla  $k_{\text{inc}} = 10$  i  $k_m = 1$  :  $SC \geq MRP \geq GSC$  (jasnoczerwone pole). Dla  $k_{\text{inc}} = 1$  i  $k_m = 10$  :  $GSC \geq MRP \geq SC$  (jasnoniebieskie pole).

Dla ustalonej wartości  $f_{\text{inc}}$  przewidywania MRP zależą od parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$ . Warto wyróżnić dwa graniczne przypadki: pierwszy, w którym każde wtrącenie styka się ze swoim sąsiadem ( $\bar{\lambda} = 0$ , Rys.2.7) oraz drugi, gdy cała osnowa znajduje się w obszarach  $\lambda_k$  i jest w płaszczu osnowy w schemacie GSC ( $\bar{\lambda} = 2R_{\text{inc}}(f_{\text{inc}}^{-1/3} - 1)$ , Rys.2.8). W pierwszym przypadku, pomijając efekt wielkości wtrąceń, wzorzec GSC zmieni się na klasyczny schemat SC i rozwiązanie MRP będzie tożsame z rozwiązaniem SC. W drugim przypadku udział objętościowy wzorca SC jest równy zero, dlatego przewidywania modelu MRP będą równe oszacowaniom modelu GSC. W związku z tym, w przypadku osnowy o mniejszej przewodności cieplnej niż wtrącenia przewidywany jest wzrost przewodności cieplnej kompozytu wraz ze spadkiem parametru upakowania.



Rysunek 2.7: Mikrostruktura RVE, w którym każde wtrącenie styka się z co najmniej jednym innym wtrąceniem ( $\bar{\lambda} = 0$ ). Rozwiązanie MRP jest tożsame z rozwiązaniem SC.



Rysunek 2.8: Mikrostruktura RVE, w którym cała osnowa znajduje się w obszarach  $\lambda_k$  i jest uwzględniona w płaszczu osnowy w schemacie GSC. Zakłada się gradację promieni sfer kompozytowych  $(R_k, \lambda_k)$  do nieskończenie małych umożliwiając wypełnienie całej reprezentatywnej objętości. Teoretycznie jest to sytuacja, gdy mamy nieskończenie wiele wtrąceń  $k \rightarrow \infty$  o różnych promieniach, także o  $R_{inc} \rightarrow 0$ , wypełniających "zakamarki" między obszarami  $\lambda_k$ , zachowując stały stosunek  $\lambda_k/(2R_k)$ . Rozwiązanie MRP jest tożsame z rozwiązaniem GSC.

## 2.2 Efektywna przewodność cieplna kompozytu

### 2.2.1 Uogólnione prawo Fouriera

Prawo Fouriera przewodzenia ciepła dla ciał anizotropowych ma postać

$$\mathbf{q} = -\mathcal{K}\nabla T \quad , \quad (2.5)$$

gdzie  $\mathbf{q}$  – gęstość strumienia ciepła [ $\frac{W}{m^2}$ ],  $\mathcal{K}$  – tensor drugiego rzędu przewodności cieplnej [ $\frac{W}{mK}$ ],  $\nabla T$  – gradient temperatury [ $\frac{K}{m}$ ]. Według tego prawa strumień ciepła jest wprost proporcjonalny do gradientu temperatury. We współrzędnych kartezjańskich:

$$\begin{aligned} -q_{xx} &= \mathcal{K}_{xx} \frac{\partial T}{\partial x} + \mathcal{K}_{xy} \frac{\partial T}{\partial y} + \mathcal{K}_{xz} \frac{\partial T}{\partial z} \\ -q_{yy} &= \mathcal{K}_{yx} \frac{\partial T}{\partial x} + \mathcal{K}_{yy} \frac{\partial T}{\partial y} + \mathcal{K}_{yz} \frac{\partial T}{\partial z} \\ -q_{zz} &= \mathcal{K}_{zx} \frac{\partial T}{\partial x} + \mathcal{K}_{zy} \frac{\partial T}{\partial y} + \mathcal{K}_{zz} \frac{\partial T}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.6)$$



Prawo to przedstawia podstawowe założenie o liniowej zależności każdej ze składowych strumienia cieplnego  $\mathbf{q}$  w dowolnym punkcie rozpatrywanego ośrodka od składowych gradientu temperatury w tym punkcie. W wielu zagadnieniach obliczeniowych wygodniej jest operować pojęciem oporu cieplnego  $\mathbf{R}$ . Wtedy prawo przewodzenia ciepła może być wyrażone jako

$$\nabla T = -\mathbf{R}\mathbf{q} \quad , \quad (2.7)$$

gdzie  $\mathbf{R}$  – tensor drugiego rzędu oporności cieplnej. Należy zwrócić uwagę na zjawisko sprzężenia między gradientem temperatury w danym kierunku, a strumieniami cieplnymi w pozostałych kierunkach. Zjawisko to nie występuje w ciałach izotropowych.

### 2.2.2 Opór cieplny Kapitzy na granicy faz

Większość badań poświęconych oszacowaniu efektywnych właściwości materiałów niejednorodnych przyjmuje założenie, że płaszczyzna połączenia (interfejs) między fazami jest doskonała. W kontekście przewodnictwa cieplnego idealnym interfejsem jest powierzchnia materiału, na której pole temperatury  $T(\mathbf{x})$  i składowa normalna strumienia cieplnego  $\mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$  do interfejsu  $x \in \Gamma$  są ciągłe (równanie 2.8).

$$T_{l+1}(\mathbf{x}) - T_l(\mathbf{x}) = 0 \quad \wedge \quad \mathbf{q}_{l+1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{q}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.8)$$

gdzie  $\mathbf{n}$  jest wektorem normalnym do powierzchni interfejsu w punkcie  $\mathbf{x}$ .

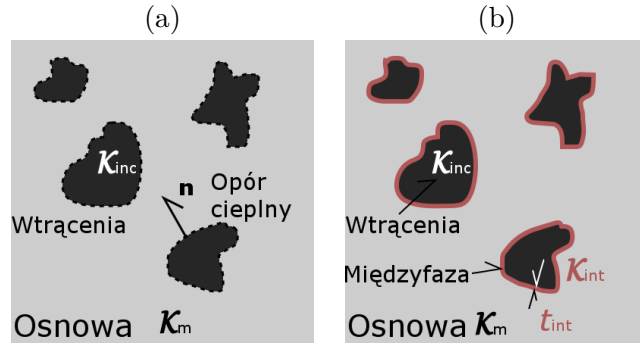
W praktyce występuje wiele sytuacji, w których założenie doskonałego interfejsu jest niewłaściwe. Często na granicy między fazami składowymi pojawia się opór cieplny, tak że strumień ciepła pozostaje ciągły, ale temperatura ulega skokowi:

$$T_{l+1}(\mathbf{x}) - T_l(\mathbf{x}) = -\alpha(\mathbf{n})\mathbf{q}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = -\alpha(\mathbf{n})\mathbf{q}_{l+1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad \wedge \quad \mathbf{q}_{l+1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{q}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad , \quad (2.9)$$

gdzie parametr  $\alpha(\mathbf{n}) = 1/\beta(\mathbf{n})$  w literaturze określa się oporem cieplnym Kapitzy.

Opór cieplny na interfejsie został po raz pierwszy zaobserwowany w 1936 r. w ciekłym helu przez Kurti i in. [81] oraz Keesom i Keesom [82], a następnie opisany przez Kapitzę w 1941 r. [83]. Obecność oporu cieplnego na płaszczyźnie kontaktu faz została również wykazana doświadczalnie na styku ciało stałe/ciało stałe przez wielu innych badaczy (np. Swartz i Pohl [84][85], Stoner [86] i Cahill [87]). W fizyce i materiałoznawstwie opór cieplny Kapitzy został uznany jako ważny teoretyczny i praktyczny parametr badań. Uwzględnienie oporu cieplnego interfejsu ma znaczenie dla rozwoju półprzewodnikowych urządzeń mikroelektronicznych, które wymagają efektywnego odprowadzania ciepła. Innym przykładem są kompozyty z interfejsem między fazami o wysokiej oporności cieplnej, które można zastosować w elementach wymagających dobrej izolacji termicznej, takich jak turbiny w silników odrzutowych. Aby osiągnąć wysoką oporność termiczną, wskazaną do tych zastosowań, są obecnie wykorzystywane kompozyty metalowo-ceramiczne lub złożone z warstw różnych materiałów. Przykładowo wpływ liczby warstw grafenu na przewodność cieplną kompozytów na bazie Ag lub Cu zbadano w [88] przy pomocy symulacji

metodą dynamiki molekularnej (ang. molecular dynamics) i wykazano, że przewodność cieplna na granicy interfejsu znacznie spada w przypadku układów zawierających więcej niż jedną warstwę grafenu. Określenie wpływu interfejsów termicznych na efektywną przewodność cieplną kompozytów w ramach modeli mikromechanicznych był przedmiotem wielu badań (patrz np. Benveniste i Miloh [90], Benveniste [91], Hasselman i Johnson [92], Lipton i Vernescu [93][94], Torquato oraz Rintoul [95], Cheng i Torquato [96], Nan i in. [97], Hashin [98], Dunn i Taya [99], Hatta i Taya [100][101]). Wszystkie te prace są ograniczone do przypadku, w którym fazy tworzące kompozyt są izotropowe.



Rysunek 2.9: (a) Kompozyt dwufazowy z oporem cieplnym Kapitzy na granicy faz. (b) Kompozyt trójfazowy z perfekcyjnym przewodzeniem ciepła na granicy faz, wtrącenia mają płaszczki międzyfazy o grubości  $t_{int}$ .  $\mathcal{K}_f$  - przewodność cieplna materiału  $f$ ,  $\mathbf{n}$  - normalna do powierzchni interfejsu wtrącenie-osnowa.

Rozważamy dwie reprezentacje materiału heterogenicznego jak na Rys.2.9: (a) dwie fazy: faza ciągła osnowy oraz rozproszona faza wtrąceń, z występującym oporem przewodzenia ciepła Kapitzy na interfejsie faz (zakładamy skok temperatury na granicy faz), (b) trzy fazy: osnowa, wtrącenia, oraz międzyfaza znajdująca się pomiędzy osnową a wtrąceniami, zakładamy perfekcyjne połączenie faz ( $\alpha(\mathbf{n}) = 0$  w Eq.2.9). Warunek skoku pola temperatury (Eq.2.9) dla obu konfiguracji jest asymptotycznie tożsamy dla modelu (N+1)-GSC, z błędem rzędu  $O(t_{int}/R_{inc})$ , gdy wprowadzona międzyfaza spełnia zależności:  $\|\mathcal{K}_{int}\| \ll \|\mathcal{K}_{inc}\| \wedge \|\mathcal{K}_{int}\| \ll \|\mathcal{K}_m\| \wedge t_{int} \ll \min(R_{inc})$  [98],[102],[103]. Możliwość zastąpienia oporu cieplnego Kapitzy  $\alpha$  wprowadzeniem międzyfazy ( $k_{int}, t_{int}$ ) w podejściu (N+1)-GSC pokazano w Dodatku C. W konfiguracji trzech faz (Rys.2.9.b) grubość wprowadzonej międzyfazy  $t_{int}$  oraz przewodność cieplna  $\mathcal{K}_{int}$  spełniają zależność [103]:

$$\alpha(\mathbf{n}) = -\frac{t_{int}}{\mathbf{n} \cdot \mathcal{K}_{int} \cdot \mathbf{n}} \quad (2.10)$$

Poniżej w podrozdziale 2.2.4 wyprowadzono zależność pomiędzy  $(k_{int}, t_{int})$ , a  $\alpha$  w modelu (N+1)-GSC z oporem cieplnym Kapitzy na interfejsie dla materiału izotropowego.

### 2.2.3 Schemat przejścia mikro-makro w modelach mikromechanicznych pola średniego

Zasadniczym aspektem różniącym modele mikromechaniczne jest przyjęty w nich schemat przejścia od zagadnienia lokalnego rozkładu pola gradientu temperatury i strumienia ciepłego do ich uśrednionych wartości tożsamy z odpowiedzią materiału jednorodnego o efektywnych właściwościach. Przy liniowych relacjach konstytutywnych, jak prawo przewodzenia ciepła, procedura wyznaczania stałych materiałowych modelem MRP bazująca na koncepcji pola średniego (ang. mean-field), jest następująca. Każdy wzorzec jest osadzony w nieskończonym medium o efektywnych parametrach materiałowych (skrót HEM). Dla każdego wzorca tensory koncentracji  $\mathbf{A}_k^\alpha$  są ustalone tak, aby realizowały liniową zależność wirtualnego pola gradientu temperatury w nieskończoności (ang. auxiliary far-field temperature gradient)  $\nabla T_0$  ze średnim gradientem temperatury  $\nabla t_k^\alpha$  w fazie  $k$  we wzorcu  $\alpha$ , to jest

$$\nabla t_k^\alpha = \mathbf{A}_k^\alpha \cdot \nabla T_0. \quad (2.11)$$

Wirtualne pole gradientu temperatury  $\nabla T_0$  nie jest równoznaczne z makroskopowym gradientem temperatury (ang. overall average temperature gradient)  $\nabla T$  w reprezentatywnej objętości. Jednakowe pole gradientu temperatury w nieskończoności  $\nabla T_0$  jest zadane dla wszystkich wzorców i jest związane z makroskopowym gradientem temperatury  $\nabla T$  formułą

$$\nabla T = \langle \nabla t \rangle_V = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \nabla t_k^\alpha = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathbf{A}_k^\alpha \cdot \nabla T_0, \quad (2.12)$$

gdzie  $t$  jest polem temperatury w reprezentatywnej objętości  $V$  oraz  $\langle \cdot \rangle_V$  jest operacją uśredniania po objętości zdefiniowaną jako  $1/V \int_V (\cdot) dV$ . Korzystając z powyższego warunku średni gradient temperatury  $\nabla t_k^\alpha$  jest określony przez tensor koncentracji dla gradientu temperatury w formie

$$\nabla t_k^\alpha = \mathbf{A}_k^\alpha \left( \sum_{\beta=1}^M c_\beta \sum_{j=1}^N f_j^\beta \mathbf{A}_j^\beta \right)^{-1} \cdot \nabla T = \bar{\mathbf{A}}_k^\alpha \cdot \nabla T, \quad \text{gdzie} \quad \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \bar{\mathbf{A}}_k^\alpha = \mathbf{I}. \quad (2.13)$$

Średni strumień ciepła  $\mathbf{q}_k^\alpha$  w fazie  $k$  we wzorcu  $\alpha$  równa się

$$\mathbf{q}_k^\alpha = -\mathcal{K}_k^\alpha \cdot \nabla t_k^\alpha = -(\mathcal{K}_k^\alpha \bar{\mathbf{A}}_k^\alpha) \cdot \nabla T \quad (2.14)$$

i makroskopowy strumień ciepła w reprezentatywnej objętości wynosi

$$\mathbf{Q} = \langle \mathbf{q} \rangle_V = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathbf{q}_k^\alpha = - \left( \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathcal{K}_k^\alpha \bar{\mathbf{A}}_k^\alpha \right) \cdot \nabla T = -\bar{\mathcal{K}} \cdot \nabla T, \quad (2.15)$$

dlatego efektywny tensor przewodności cieplnej reprezentatywnej objętości kompozytu wyraża się wzorem

$$\bar{\mathcal{K}} = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathcal{K}_k^\alpha \bar{\mathbf{A}}_k^\alpha. \quad (2.16)$$

Przy założeniu, że dana faza ma jednakowe parametry materiałowe niezależnie od wzorca wtedy lokalny tensor przewodności cieplnej fazy  $\mathcal{K}_k^\alpha$  nie zależy od wzorca (wskaźnik  $\alpha$ ) tj.  $\mathcal{K}_k^\alpha = \mathcal{K}_k$ . Tensory koncentracji dla schematu samozgodnego i uogólnionego schematu samozgodnego dla sfery kompozytowej z (N-1)-płaszczzami wyznaczono w załączniku (Dodatek A).

#### 2.2.4 Współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu w modelach klasycznych

W tym rozdziale pracy doktorskiej przedyskutowano zależności na efektywny współczynnik przewodzenia ciepła izotropowego kompozytu dwufazowego wg. modeli klasycznych dostępnych w literaturze.

Minimalizując energię w zadaniu homogenizacji materiału heterogenicznego, dla dopuszczalnych pól gradientu temperatury lub strumienia cieplnego, otrzymujemy oszacowania graniczne [95]. Najbardziej uproszczone podejścia graniczne Voigta i Reussa bazują na regule mieszanin. W metodzie Voigta zakładamy jednakowy gradient temperatury w całym RVE, czyli taki sam w każdej fazie, natomiast dla Reussa przyjmujemy stały strumień ciepła.

$$\bar{k}^{\text{Voigt}} = f_{\text{inc}}k_{\text{inc}} + (1 - f_{\text{inc}})k_{\text{m}} \quad , \quad \bar{k}^{\text{Reuss}} = (f_{\text{inc}}/k_{\text{inc}} + (1 - f_{\text{inc}})/k_{\text{m}})^{-1} \quad . \quad (2.17)$$

W przeciwieństwie do rozwiązań Voigta i Reussa w metodzie Hashina-Shtrikmana dopuszczamy jednorodne pola w poszczególnych niejednorodnościach kompozytu. Oszacowanie graniczne Hashina-Shtrikmana [46]: górne i dolne dla  $k_1 > k_2$  ma postać:

$$\bar{k}^{\text{HS}} = \frac{k_1f_1 + k_2(3f_2k_1)/(2k_1 + k_2)}{f_1 + (3f_2k_1)/(2k_1 + k_2)} \quad , \quad \bar{k}^{\text{SH}} = \frac{k_2f_2 + k_1(3f_1k_2)/(2k_2 + k_1)}{f_2 + (3f_1k_2)/(2k_2 + k_1)} \quad . \quad (2.18)$$

W przypadku materiałów liniowo sprężystych, bardziej zaawansowane modele mikromechaniczne wykorzystują dostępne w literaturze rozwiązania analityczne, takie jak rozwiązanie Eshelby'ego (trzy publikacje z lat od 1957 do 1961) dla elipsoidalnej inkluzji w nieskończonej matrycy czy podobne rozwiązanie autorstwa Herve i Zaoui [73] dla sferycznej inkluzji kompozytowej o N-fazach. Koncepcja pojedynczej niejednorodności w sprężystej matrycy stała się podstawą licznych modeli pola średniego. Jako przykładowe można tu wymienić modele Mori-Tanaka (MT), samozgodny (SC), uogólniony samozgodny (GSC), podwójnej inkluzji, różnicowy i przyrostowy, [1]. Rozwiązanie analogiczne do rozwiązania Eshelby'ego dla problemu stacjonarnego przepływu ciepła zostało podane w pracy [100]. Na jego bazie można znaleźć oszacowania efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła analogiczne do oszacowań dostępnych dla niejednorodnych materiałów liniowo sprężystych.

Wzory na efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu dwufazowego, z izotropowymi komponentami, z oporem cieplnym Kapitzy  $\alpha$  na interfejsie faz, kolejno dla modeli: rozproszonych wtrąceń (ang. Dilute Dispersion) - DD, Mori-Tanaka - MT, schemat samozgodny - SC i jego uogólnienia - GSC, można znaleźć w publikacji [80]:

$$\begin{aligned}\bar{k}^{\text{DD}} &= k_m \left( 1 + \frac{3f_{\text{inc}}(k_m - k_{\text{inc}} + \alpha k_m k_{\text{inc}}/R)}{k_{\text{inc}} + 2k_m(1 + \alpha k_{\text{inc}}/R)} \right)^{-1} \\ \bar{k}^{\text{GSC}} = \bar{k}^{\text{MT}} &= k_m \left( 1 + \frac{3f_{\text{inc}}(k_m - k_{\text{inc}} + \alpha k_m k_{\text{inc}}/R)}{3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}} + f_m(2k_m(1 + \alpha k_{\text{inc}}/R) + k_{\text{inc}})} \right)^{-1} \\ \bar{k}^{\text{SC}} &= k_m \left( 1 + \frac{3f_{\text{inc}}(k_m - k_{\text{inc}} + \alpha k_m k_{\text{inc}}/R)}{k_{\text{inc}} + 2\bar{k}^{\text{SC}}(1 + \alpha k_{\text{inc}}/R)} \right)^{-1}\end{aligned}\quad (2.19)$$

Model rozproszonych wtrąceń zakłada małą koncentrację fazy zbrojenia w kompozycie. Takie założenie pozwala na zaniechanie uwzględnienia interakcji pomiędzy wtrąceniami w modelu rozproszonych wtrąceń, dlatego daje poprawne rezultaty jedynie dla niewielkich udziałów objętościowych fazy wtrąceń. Wraz ze wzrostem udziału fazy zbrojenia w kompozycie wzrasta wpływ interakcji między wtrąceniami na efektywną odpowiedź kompozytu i tym samym maleje dokładność przewidywań modelu rozproszonych wtrąceń. Interakcje między wtrąceniami są uwzględnione w schemacie samozgodnym. Schemat samozgodny opiera się na rozwiązaniu Eshelby'ego dla elipsoidalnej inkluzji znajdującej się w nieskończonym medium z przemieszczeniowymi lub naprężeniowymi warunkami brzegowymi zadanymi w nieskończoności. Otaczające elipsoidalną inkluzję medium jest jednorodnym ośrodkiem o szukanych efektywnych właściwościach (samozgodne zadanie homogenizacji), które uwzględnia interakcje między wtrąceniami. Uogólnienie schematu samozgodnego polega na umieszczeniu sfery kompozytowej w miejscu elipsoidalnej inkluzji. Rozwiązaniem schematu samozgodnego w przypadku szacowania współczynnika przewodzenia ciepła są pierwiastki równania kwadratowego wynikającego z zanurzenia inkluzji w medium o szukanych parametrach materiałowych. W 1972 roku opublikowano mniej niż dwustronicową notatkę techniczną w *Journal of Elasticity* autorstwa Tanaki i Moriego, w której opisano ważną konsekwencję skalowalności tensora Eshelby'ego dla elipsoidalnej inkluzji otoczonej płaszczem innego materiału. Dziś lemat Tanaki-Moriego jest fundamentem najbardziej popularnego z wymienionych modeli pola średniego tj. modelu Mori-Tanaka [27]. Na podstawie lematu Tanaki-Moriego uśrednione pole perturbacji (ang. disturbance fields, dla zadania homogenizacji przewodnictwa cieplnego będą to pola strumienia ciepła bądź gradientu temperatury w zależności od warunków brzegowych RVE), wynikające z obecności inkluzji w jednorodnym medium, zeruje się w płaszczu inkluzji. Klasyczny model Mori-Tanaka stosuje się do kompozytów dwufazowych, dla których rozwiązuje się zadanie elipsoidalnej inkluzji otoczonej płaszczem osnowy w nieskończonym medium. Ze względu na jednakowy kształt faz, korzystając z lematu Tanaki-Moriego uzyskuje się analityczny wzór na efektywne właściwości kompozytu.

Jak wspomniano wcześniej efektywny współczynnik przewodzenia ciepła schematu samozgodnego otrzymamy znajdując pierwiastki  $\bar{k}^{\text{SC}}$  równania 2.19.3. Zakładamy nieujemny opór

cieplny Kapitzy na granicy faz  $\alpha \geq 0$ , dodatni efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}^{\text{SC}} > 0$ , osnowy  $k_m > 0$  i wtrąceń  $k_{\text{inc}} > 0$  oraz udział objętościowy wtrąceń w przedziale  $0 \leq f_{\text{inc}} \leq 1$ . Dla przyjętych założeń równanie kwadratowe 2.19.3 ma  $\Delta > 0$  i dodatni pierwiastek  $\bar{k}^{\text{SC}} > 0$  w postaci:

$$\bar{k}^{\text{SC}} = \frac{1}{4} \left( (S_m - S_{\text{inc}} S_\alpha) + \sqrt{(S_m - S_{\text{inc}} S_\alpha)^2 + 8k_{\text{inc}} k_m S_\alpha} \right), \quad (2.20)$$

gdzie  $S_{\text{inc}} = k_{\text{inc}}(1 - 3f_{\text{inc}})$  to człon pochodzący od wtrąceń  $k_{\text{inc}}$ ,  $S_m = k_m(2 - 3f_{\text{inc}})$  od osnowy  $k_m$  i  $S_\alpha = \frac{R}{\alpha k_{\text{inc}} + R}$  od oporu przewodzenia ciepła Kapitzy  $\alpha$ . Dla perfekcyjnego przewodzenia ciepła na granicy faz  $\alpha = 0$  człon  $S_\alpha = 1$ , wtedy rozwiązanie  $\bar{k}^{\text{SC}}$  upraszcza się do:

$$\bar{k}^{\text{SC}}(\alpha = 0) = \frac{1}{4} \left( (S_m - S_{\text{inc}}) + \sqrt{(S_m - S_{\text{inc}})^2 + 8k_{\text{inc}} k_m} \right). \quad (2.21)$$

Jak wspomniano wcześniej (Rys.2.9) opór cieplny Kapitzy  $\alpha$  można zastąpić wprowadzeniem międzyfazy ( $k_{\text{int}}, t_{\text{int}}$ ) w podejściu (N+1)-GSC. W przypadku kompozytu dwufazowego,  $k_{\text{inc}}$  i  $k_m$ , ze sferycznymi wtręciami o promieniu  $R$  i udziale objętościowym  $f_{\text{inc}}$  mamy dwa możliwe opisy:

- model 3-GSC, z oporem cieplnym na granicy faz  $\alpha$ , wzór 2.19.2,
- model 4-GSC, z perfekcyjnym interfejsem między fazami, z międzyfazą o parametrach  $k_{\text{int}} = -t_{\text{int}}/\alpha$  i  $t_{\text{int}} = \gamma R$ .

Zależność obu podejść przedstawiono w załączniku (Dodatek C). Model morfologicznej reprezentacji kompozytu, opisany w [55], bazuje na rozwiązaniu SC oraz (N+1)-GSC. W zaprezentowanych w dalszej części wynikach zastąpiono w modelu MRP opór cieplny Kapitzy  $\alpha$  wprowadzeniem dodatkowej międzyfazy o parametrach  $t_{\text{int}}$  i  $k_{\text{int}}$  spełniających zależność Eq.2.10. Na podstawie wykonanych symulacji zastąpienie oporu Kapitzy międzyfazą daje rezultaty o błędzie rzędu  $O(t_{\text{int}}/R_{\text{inc}})$ , który dla założenia  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} \leq 10^{-6}$  jest pomijalny (Dodatek C).

W tabeli 2.1 zebrano wartości graniczne efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  wybranych modeli mikromechanicznych. Wprowadzone oznaczenia modeli mikromechanicznych: DD - rozproszonych wtrąceń, SC - schematu samozgodnego, GSC - uogólnienie schematu samozgodnego, tożsame dla przyjętych założeń modelowi Mori-Tanaka. Wyznaczono wartości graniczne efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  dla parametrów:  $R$  - promień wtrąceń,  $\alpha$  - opór cieplny Kapitzy,  $k_{\text{inc}}$  - współczynnik przewodzenia ciepła fazy wtrąceń i dla kompletności wyników  $k_m$  - współczynnik przewodzenia ciepła fazy osnowy, dążących odpowiednio do nieskończoności i zera. Z uzyskanych granic (Tab.2.1) wynika, że efektywny współczynnik przewodności cieplnej  $\bar{k}$  jest jednakowy dla:  $\beta \rightarrow 0$  ( $\alpha \rightarrow \infty$ ),  $R_{\text{inc}} \rightarrow 0$  oraz  $k_{\text{inc}} \rightarrow 0$ , będąc równym  $\bar{k}$  kompozytu z pustkami.

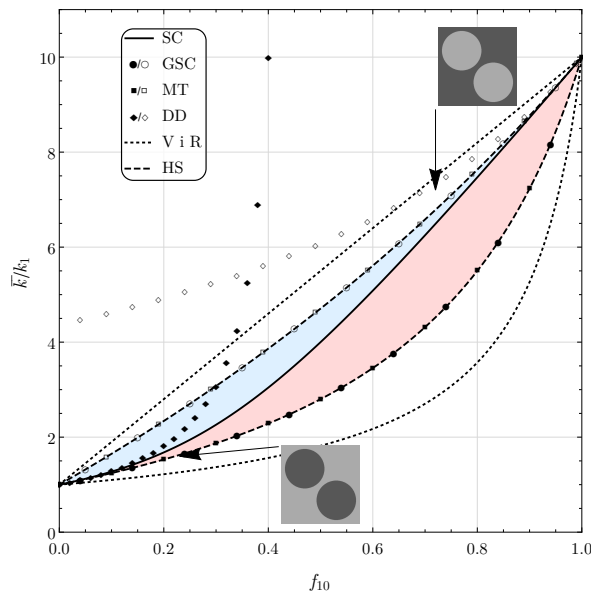
$\bar{k}$ :	$\bar{k}^{\text{DD}}$	$\bar{k}^{\text{SC}}$	$\bar{k}^{\text{GSC}}$
$R \rightarrow \infty$	$\frac{k_m(k_{\text{inc}}+2k_m)}{-3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}}+(3f_{\text{inc}}+2)k_m+k_{\text{inc}}}$	$\frac{k_m(k_{\text{inc}}+2\bar{k}^{\text{SC}})}{-3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}}+3f_{\text{inc}}k_m+k_{\text{inc}}+2\bar{k}^{\text{SC}}}$	$\frac{k_m(3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}}+f_m(k_{\text{inc}}+2k_m))}{3f_{\text{inc}}k_m+f_m(k_{\text{inc}}+2k_m)}$
$\beta \rightarrow \infty$	$\frac{k_m(k_{\text{inc}}+2k_m)}{-3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}}+(3f_{\text{inc}}+2)k_m+k_{\text{inc}}}$	$\frac{k_m(k_{\text{inc}}+2\bar{k}^{\text{SC}})}{-3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}}+3f_{\text{inc}}k_m+k_{\text{inc}}+2\bar{k}^{\text{SC}}}$	$\frac{k_m(3f_{\text{inc}}k_{\text{inc}}+f_m(k_{\text{inc}}+2k_m))}{3f_{\text{inc}}k_m+f_m(k_{\text{inc}}+2k_m)}$
$k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$	$\frac{k_m(2\alpha k_m+R)}{\alpha(3f_{\text{inc}}+2)k_m-3f_{\text{inc}}R+R}$	$\frac{k_m(2\alpha\bar{k}^{\text{SC}}+R)}{3\alpha f_{\text{inc}}k_m-3f_{\text{inc}}R+2\alpha\bar{k}^{\text{SC}}+R}$	$\frac{k_m(3f_{\text{inc}}R+f_m(2\alpha k_m+R))}{3\alpha f_{\text{inc}}k_m+f_m(2\alpha k_m+R)}$
$k_m \rightarrow \infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$
$R \rightarrow 0$	$\frac{2k_m}{3f_{\text{inc}}+2}$	$\frac{2k_m\bar{k}^{\text{SC}}}{3f_{\text{inc}}k_m+2\bar{k}^{\text{SC}}}$	$\frac{2f_mk_m}{3f_{\text{inc}}+2f_m}$
$\beta \rightarrow 0$	$\frac{2k_m}{3f_{\text{inc}}+2}$	$\frac{2k_m\bar{k}^{\text{SC}}}{3f_{\text{inc}}k_m+2\bar{k}^{\text{SC}}}$	$\frac{2f_mk_m}{3f_{\text{inc}}+2f_m}$
$k_{\text{inc}} \rightarrow 0$	$\frac{2k_m}{3f_{\text{inc}}+2}$	$\frac{2k_m\bar{k}^{\text{SC}}}{3f_{\text{inc}}k_m+2\bar{k}^{\text{SC}}}$	$\frac{2f_mk_m}{3f_{\text{inc}}+2f_m}$
$k_m \rightarrow 0$	0	0	0

Tabela 2.1: Wartości graniczne efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  wybranych modeli mikromechanicznych.

### 2.2.5 Przewidywania modeli mikromechanicznych dla kompozytu dwufazowego z doskonałym połączeniem faz

Analogicznie jak na wcześniejszym Rys.2.6 zbadano kompozyt dwufazowy w dwóch konfiguracjach: słabo przewodząca osnowa zbrojona dobrze przewodzącymi wtrąceniami i odwrotnie. Współczynniki przewodzenia ciepła fazy dobrze przewodzącej ciepło to  $k_{10} = 10$  oraz słabo przewodzącej ciepło to  $k_1 = 1$ . Na wykresie 2.10 zaprezentowano efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  w funkcji udziału objętościowego fazy dobrze przewodzącej  $f_{10}$ , co pozwala zobrazować, które modele mikromechaniczne są czułe na wybór ciągłej osnowy pomiędzy fazami o  $k_{10} = 10$  lub  $k_1 = 1$ . Przewidywania modeli mikromechanicznych: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MT – model Mori-Tanaka, DD – model rozproszonych wtrąceń, V i R – Voigt i Reuss, HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-

Shtrikmana. Na Rys.2.10 widać różnicę przewidywań modeli DD, MT i GSC w zależności od układu kompozytu, podczas gdy proste modele Voigta i Reussa, graniczne Hashina-Shtrikmana oraz schemat samozgodny nie rozróżniają w swoich przewidywaniach fazy ciągłej i fazy rozproszonej. Przewidywania MRP dla konfiguracji kompozytu o dobrze przewodzących wtrąceniach  $k_{inc} = 10$  i słabo przewodzącej osnowie  $k_m = 1$  znajdują się w jasnoczerwonym polu,  $SC \geq MRP \geq GSC$ . Dla odwrotnej konfiguracji kompozytu, o słabo przewodzących wtrąceniach  $k_{inc} = 1$  i dobrze przewodzącej osnowie  $k_m = 10$ , przewidywania MRP znajdują się w jasnoniebieskim polu,  $GSC \geq MRP \geq SC$ . Przewidywania GSC, MT oraz odpowiednia dla rozpatrywanej konfiguracji kompozytu granica HS są jednakowe.

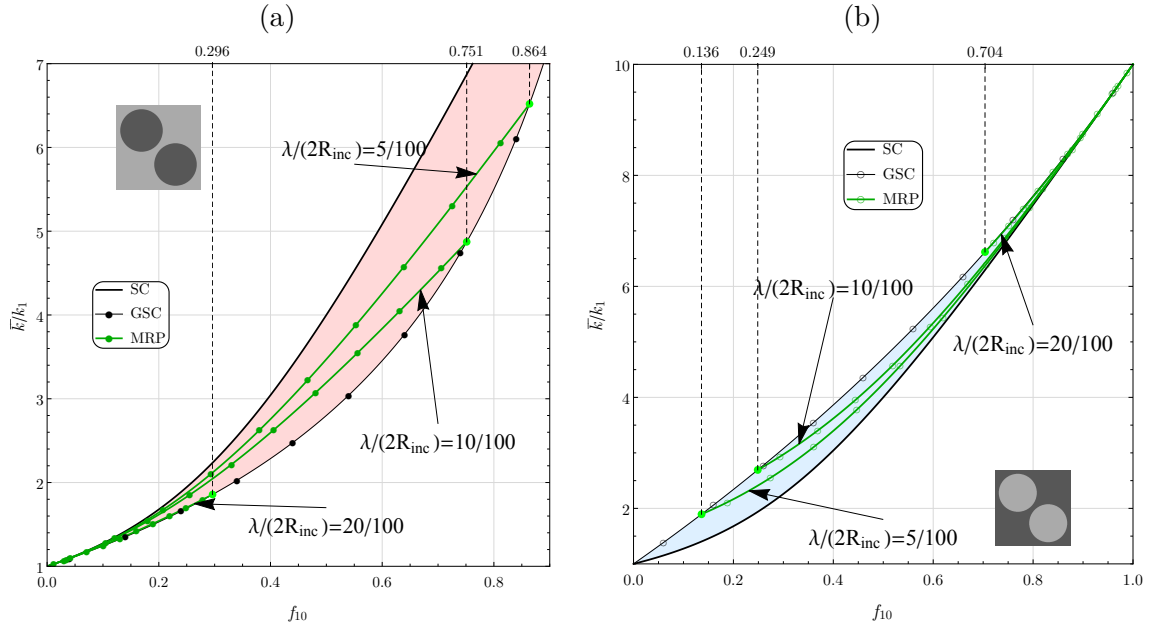


Rysunek 2.10: Stosunek efektywnego przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  do współczynnika przewodzenia ciepła fazy słabo przewodzącej  $k_1 = 1$  vs. udział objętościowy fazy dobrze przewodzącej  $f_{10}$  o  $k_{10} = 10$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MT – model Mori-Tanaka, DD – model rozproszonych wtrąceń, V i R – oszacowania graniczne Voigta i Reussa, HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-Shtrikmana. Przewidywania MRP dla  $k_{inc} = 10$  i  $k_m = 1$ :  $SC \geq MRP \geq GSC$  (jasnoczerwone pole), natomiast dla  $k_{inc} = 1$  i  $k_m = 10$ :  $GSC \geq MRP \geq SC$  (jasnoniebieskie pole). Przewidywania GSC, MT oraz odpowiednie oszacowanie HS są jednakowe. Modele DD, GSC i MT rozróżniają konfigurację kompozytu.

Na wykresach 2.11 pokazano przewidywania modelu MRP przy założeniu stałego parametru upakowania  $\lambda/(2R_{inc}) = 0.05, 0.10$  lub  $0.20$ . Rys.2.10.a prezentuje wyniki kompozytu o dobrze przewodzących wtrąceniach  $k_{inc} = 10$  i słabo przewodzącej osnowie  $k_m = 1$ , natomiast Rys.2.10.b to kompozyt o słabo przewodzących wtrąceniach  $k_{inc} = 1$  i dobrze przewodzącej osnowie  $k_m = 10$ . Dla ustalonej wartości  $f_{inc}$  przewidywania MRP zależą od parametru upakowania



$\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$ . Warto wyróżnić dwa graniczne przypadki: pierwszy, w którym każde wtrącenie styka się ze swoim sąsiadem ( $\bar{\lambda} = 0$ , Rys.2.7) oraz drugi, gdy cała osnowa znajduje się w obszarach  $\lambda_k$  i jest w płaszczy osnowy w schemacie GSC ( $\bar{\lambda} = 2R_{\text{nci}}(f_{\text{inc}}^{-1/3} - 1)$ , Rys.2.8). W drugim przypadku udział objętościowy wzorca SC jest równy zero, dlatego przewidywania modelu MRP będą równe oszacowaniom modelu GSC. Na Rys.2.11 sytuacja ta odpowiada możliwym maksymalnym udziałom objętościowym inkluzji w przewidywaniach MRP, zaznaczonych przerywaną linią dla zadanego parametru upakowania  $\lambda/(2R_{\text{inc}})$ .



Rysunek 2.11: Stosunek efektywnego przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  do współczynnika przewodzenia ciepła fazy słabo przewodzącej  $k_1 = 1$  vs. udział objętościowy fazy dobrze przewodzącej  $f_{10}$  o  $k_{10} = 10$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji kompozytu. W przewidywaniach MRP parametr upakowania  $\lambda/(2R_{\text{inc}})$  przyjęto jako stały: 5/100, 10/100 lub 20/100. Parametry materiałowe kompozytu: (a)  $k_{\text{inc}} = 10$  i  $k_{\text{m}} = 1$ , (b)  $k_{\text{inc}} = 1$  i  $k_{\text{m}} = 10$ .

## 2.3 Efektywny tensor sztywności sprężystej kompozytu

### 2.3.1 Uogólnione prawo Hooke'a

Najogólniejsza postać związków fizycznych wiążących ze sobą wartości tensorów: naprężenia  $\sigma$  i odkształcenia  $\varepsilon$  w ciałach liniowo sprężystych jest następująca:

$$\sigma(\varepsilon) = \mathbb{L} \cdot \varepsilon \quad \text{lub} \quad \varepsilon(\sigma) = \mathbb{M} \cdot \sigma, \quad (2.22)$$

gdzie  $\mathbb{L}$  jest tensorem sztywności (sprężystości) oraz  $\mathbb{M} = \mathbb{L}^{-1}$  jest tensorem podatności.  $\mathbb{L}$  i  $\mathbb{M}$  są tensorami czwartego rzędu stałych materiałowych i jeżeli materiał jest izotropowy to także tensory  $\mathbb{L}$  i  $\mathbb{M}$  są izotropowe. Związki fizyczne 2.22 liniowej sprężystości są także nazywane konstytutywnymi lub uogólnionym prawem Hooke’a. Założenia uogólnionego prawa Hooke’a  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon})$  (analogicznie  $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\sigma})$ ):

- zależność  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon})$  jest liniowa,
- istnieje stan naturalny tzn.  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ ,
- zależność  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon})$  dla każdej chwili czasu jest taka sama,
- brak wpływu temperatury na zależność  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon})$ .

### 2.3.2 Niedoskonały interfejs na granicy faz

Efektywne właściwości materiałów kompozytowych zależą od jakości interfejsu pomiędzy fazami materiału niejednorodnego. Jakość połączenia między fazami odpowiada za transfer pól mechanicznych między zbrojeniem i osnową, a tym samym za jakość wzmocnienia ciągłej osnowy rozproszonym zbrojeniem (wtrąceniami bądź włóknami). Defekty i uszkodzenia występują najczęściej w strefie kontaktu zbrojenie-osnowa. Mogą to być: zerwanie wiązań *debonding*, dyslokacje międzyfazowe *interfacial dislocations*, pęknięcia interfejsu *interface cracks* itp., dlatego aby poprawnie oszacować makroskopowe parametry materiału heterogenicznego należy uwzględnić w homogenizacji właściwości i strukturę interfejsu.

Wiązanie międzyfazowe jest jednym z ważnych czynników, który kontroluje lokalne pola sprężyste i makroskopowe właściwości kompozytów oraz materiałów polikrystalicznych. W wielu przypadkach w tych materiałach może występować niedoskonałe wiązanie międzyfazowe np. w [106]. Zhang i Hack [110] zwracają uwagę, że zmiękczenie granic ziaren jest ważne nie tylko w materiałach nanokrystalicznych, ale również w konwencjonalnych materiałach, w których może wystąpić kawitacja granicy ziaren i pękanie międzykrystaliczne np. w [107],[108],[109].

W literaturze rozróżnia się dwa podejścia do symulacji właściwości obszarów interfejsu w kompozytach i materiałach polikrystalicznych. Pierwsze podejście skupia się na modelowaniu warunków ciągłości pól mechanicznych na interfejsie, w którym zakłada się, że na interfejsie istnieją przesunięcia i/lub nieciągłości naprężenia. W tym podejściu można wyróżnić: proste modele liniowe np. podatny lub sprężysty interfejs *the linear spring-layer model* w którym zakłada się skok przemieszczeń [111], albo zaawansowane modele jak w pracy Gurtina-Murdocha [112].

Drugie podejście opiera się na wprowadzeniu dodatkowej międzyfazy, która reprezentuje obszar interfejsu jako warstwę pomiędzy niejednorodnością i osnową. Parametry materiałowe międzyfazy różnią się od modułów osnowy i wtrąceń oraz mogą być jednorodne lub zmienne. Oczywiście można połączyć oba podejścia gdy wtrącenia mają formę np. sfer kompozytowych o różnych parametrach interfejsu między kolejnymi płaszczyznami.

W niniejszej pracy zastosowano oba podejścia. Pokazano również, że liniowy model interfejsu w homogenizacji może być zastąpiony wprowadzeniem dodatkowej międzyfazy, co wykazano w załączniku (Dodatek C). Szeroko zakrojone badania na temat modelowania wpływu interfejsu lub międzyfazy na sprężystą odpowiedź konwencjonalnych kompozytów wzmacnianych cząstkami i włóknami zostały zaprezentowane w pracach [111], [113], [114], [115], [116], [117], [118], [119], [120], [121], [122].

W kontekście mechaniki ośrodków ciągłych idealnym interfejsem  $\Gamma$  jest powierzchnia materiału, na której pole przemieszczeń  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  i wektor naprężenia  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})$  dla  $x \in \Gamma$  są ciągłe (Eq.2.23).

$$\mathbf{u}_{l+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_l(\mathbf{x}) = 0 \quad \wedge \quad \boldsymbol{\sigma}_{l+1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}). \quad (2.23)$$

Niedoskonałości połączenia między fazami odwzorowane są w formie skoku przemieszczeń na interfejsie (przerwania ich ciągłości) podczas gdy naprężenia muszą pozostać w stanie równowagi. Najprostszy matematyczny opis niedoskonałego interfejsu (ang. imperfect interface) bazuje na założeniu, że normalna i styczna skoku przemieszczeń są proporcjonalne do odpowiednich komponentów naprężenia:

$$\mathbf{u}_{l+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}_l(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\Psi} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{l+1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})) = \boldsymbol{\Psi} \cdot (\boldsymbol{\sigma}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x})) \wedge \boldsymbol{\sigma}_{l+1}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\sigma}_l(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}), \quad (2.24)$$

gdzie  $\boldsymbol{\Psi}$  to tensor drugiego rzędu reprezentujący tensor podatności interfejsu (ang. compliance of spring layer model). W Eq.2.24 wartość  $\boldsymbol{\Psi} = \mathbf{0}$  odpowiada doskonałemu połączeniu faz, natomiast  $\boldsymbol{\Psi} \rightarrow \infty$  całkowitemu zerwaniu połączenia między fazami. Małe wartości tensora podatności interfejsu  $\boldsymbol{\Psi}$  odpowiadają osłabieniu połączenia pomiędzy komponentami materiału niejednorodnego. Zakłada się, że tensor podatności  $\boldsymbol{\Psi}$  interfejsu jest symetryczny i dodatnio zdefiniowany o postaci:

$$\boldsymbol{\Psi} = \mu \mathbf{I} + (\eta - \mu) \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}, \quad (2.25)$$

w której skalary  $\eta$  i  $\mu$  odpowiadają za składową normalną i styczną skoku wektora przemieszczenia. Przykładowo gdy  $\eta = 0$  zależność Eq.2.25 pozwala na poślizg na granicy pomiędzy fazami o wartość  $\mu$ , ale nie na ich separację.

Podobnie jak opór cieplny Kapitzy  $\alpha$  można zastąpić cienką międzyfazą (ang. interphase, Eq.2.10, Dodatek C), także osłabienie interfejsu, zamodelowane interfejsem o podatności  $\boldsymbol{\Psi}$  Eq.2.25, można zaproksymować wprowadzeniem dodatkowej międzyfazy [111]:

$$\mu = t_{\text{int}}/G_{\text{int}} \quad \wedge \quad \eta = 3t_{\text{int}}/(3K_{\text{int}} + 4G_{\text{int}}) \quad (2.26)$$

dla izotropowych faz kompozytu, gdzie  $K_{\text{int}}$  i  $G_{\text{int}}$  to moduł objętościowy i ścinania międzyfazy, a  $t_{\text{int}}$  to grubość warstwy międzyfazy. Analogicznie jak dla oporu cieplnego Kapitzy  $\alpha$  (Eq.2.10), z zastrzeżeniem, że równania są teraz równaniami tensorowym drugiego rzędu, a odpowiednie tensory koncentracji tensorami czwartego rzędu, błąd aproksymacji osłabionego podatnego interfejsu  $\boldsymbol{\Psi}$  za pomocą wprowadzeniem dodatkowej międzyfazy jest pomijalny gdy  $t_{\text{int}} \ll \min(R_{\text{inc}})$  oraz  $\mathbb{L}_{\text{int}} \ll \mathbb{L}_{\text{inc}}$  i  $\mathbb{L}_{\text{int}} \ll \mathbb{L}_{\text{m}}$  (Dodatek C) [111].

### 2.3.3 Schemat przejścia mikro-makro w modelach mikromechanicznych pola średniego

Związek konstytutywny  $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon})$  jest relacją liniową, dlatego procedura wyznaczania efektywnych stałych materiałowych modelem MRP dla uogólnionego prawa Hooke'a jest analogiczna jak dla prawa Fouriera. Klasyczne podejścia pola średniego są modyfikowane przez specyfikację tensorów koncentracji opisujących zależność lokalnych pól tensorowych naprężenie-odkształcenie od odpowiednich wielkości makroskopowych. Dla każdego wzorca tensory koncentracji  $\mathbb{A}_k^\alpha$  są ustalane tak, aby realizowały liniową zależność wirtualnego pola odkształceń w nieskończoności (ang. auxiliary far-field strain)  $\mathbf{E}_0$  ze średnim odkształceniem  $\boldsymbol{\varepsilon}_k^\alpha$  w fazie  $k$  we wzorcu  $\alpha$ , to jest

$$\boldsymbol{\varepsilon}_k^\alpha = \mathbb{A}_k^\alpha \cdot \mathbf{E}_0. \quad (2.27)$$

Wirtualne pole odkształcenia  $\mathbf{E}_0$  nie jest równoznaczne z makroskopowym odkształceniem (ang. overall average strain)  $\mathbf{E}$  w reprezentatywnej objętości. Jednakowe pole odkształcenia w nieskończoności  $\mathbf{E}_0$  jest zadane dla wszystkich wzorców i jest związane z makroskopowym odkształceniem  $\mathbf{E}$  formułą

$$\mathbf{E} = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_V = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \boldsymbol{\varepsilon}_k^\alpha = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathbb{A}_k^\alpha \cdot \mathbf{E}_0, \quad (2.28)$$

gdzie  $\boldsymbol{\varepsilon}$  jest polem odkształcenia w reprezentatywnej objętości  $V$  oraz  $\langle \cdot \rangle_V$  jest operacją uśredniania po objętości zdefiniowaną jako  $1/V \int_V (\cdot) dV$ . Korzystając z powyższego warunku uśrednione odkształcenie  $\boldsymbol{\varepsilon}_k^\alpha$  jest określone przez tensor koncentracji dla odkształceń w formie

$$\boldsymbol{\varepsilon}_k^\alpha = \mathbb{A}_k^\alpha \left( \sum_{\beta=1}^M c_\beta \sum_{j=1}^N f_j^\beta \mathbb{A}_j^\beta \right)^{-1} \cdot \mathbf{E} = \bar{\mathbb{A}}_k^\alpha \cdot \mathbf{E}, \quad \text{gdzie} \quad \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \bar{\mathbb{A}}_k^\alpha = \mathbb{I}. \quad (2.29)$$

Uśrednione naprężenie  $\boldsymbol{\sigma}_k^\alpha$  w fazie  $k$  we wzorcu  $\alpha$  równa się

$$\boldsymbol{\sigma}_k^\alpha = \mathbb{L}_k^\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k^\alpha = (\mathbb{L}_k^\alpha \bar{\mathbb{A}}_k^\alpha) \cdot \mathbf{E} \quad (2.30)$$

i makroskopowe naprężenie w reprezentatywnej objętości wynosi

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_V = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \boldsymbol{\sigma}_k^\alpha = \left( \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathbb{L}_k^\alpha \bar{\mathbb{A}}_k^\alpha \right) \cdot \mathbf{E} = \bar{\mathbb{L}} \cdot \mathbf{E}, \quad (2.31)$$

dlatego efektywny tensor sztywności reprezentatywnej objętości kompozytu równa się

$$\bar{\mathbb{L}} = \sum_{\alpha=1}^M c_\alpha \sum_{k=1}^N f_k^\alpha \mathbb{L}_k^\alpha \bar{\mathbb{A}}_k^\alpha. \quad (2.32)$$

W odróżnieniu od zapisu w publikacji [45] powyższa notacja pozwala na bezpośrednie rozszerzenie podejścia do przypadków gdy fazy materiału są sprężysto-plastyczne lub w ogólności nieliniowe. Przy założeniu, że dana faza ma jednakowe parametry materiałowe niezależnie od wzorca wtedy lokalny tensor sztywności fazy  $\mathbb{L}_k^\alpha$  nie zależy od wzorca (wskaźnik  $\alpha$ ) tj.  $\mathbb{L}_k^\alpha = \mathbb{L}_k$ . Tensory koncentracji dla schematu samozgodnego i uogólnionego schematu samozgodnego dla sfery kompozytowej z (N-1)-płaszczyznami wyznaczono w załączniku (Dodatek B).

### 2.3.4 Tensor sztywności sprężystej kompozytu w modelach klasycznych

Dla izotropowych faz oraz sferycznych wtrąceń, rozmieszczonych w kompozycie bez wyróżnionego kierunku, tensor koncentracji  $\mathbb{A}_k^\alpha$  jest izotropowym tensorem czwartego rzędu określonym przez dwa skalary:  $\alpha_{P_k}^\alpha$ ,  $\alpha_{D_k}^\alpha$  które zależą od morfologii wzorców i mają postać:

$$\mathbb{A}_k^\alpha = \alpha_{P_k}^\alpha \mathbb{I}^P + \alpha_{D_k}^\alpha (\mathbb{I} - \mathbb{I}^P), \quad \mathbb{I}^P = \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I}, \quad (2.33)$$

gdzie  $\mathbf{I}$  i  $\mathbb{I}$  to tensory identyczności (tożsamości) odpowiednio drugiego i czwartego rzędu. Podstawowe morfologie wzorców to: schemat samozgodny SC, 3-fazowy model GSC (Rys. 2.1.b) lub model 4-fazowy GSC (Rys. 2.1.c). Odpowiednią formułę dla tensora koncentracji  $\alpha_{P_k}^\alpha$ ,  $\alpha_{D_k}^\alpha$  można znaleźć m.in. w [73] i [18]. W Tabeli 2.2 umieszczono współczynniki koncentracji dla niektórych modeli mikromechanicznych średniego pola [75], których główną koncepcję opisano w rozdziale 2.2.4. Dla schematu samozgodnego SC i (N+1)-fazowego uogólnionego schematu samozgodnego (N+1)-GSC (w tym GSC) wyprowadzenie tensorów koncentracji odkształceń umieszczono w materiałach pomocniczych na końcu pracy doktorskiej (Dodatek B). Model Mori-Tanaka dla kompozytu dwufazowego z podatnym interfejsem między fazami zaadoptowano z pracy [117].

Tabela 2.2: Tensory koncentracji odkształceń dla niejednorodności w izotropowym materiale heterogenicznym o dwóch fazach z doskonałym połączeniem faz. Dla modeli mikromechanicznych MT i SC założono sferyczny kształt wtrąceń.

Schemat uśredniania	$\alpha_{inc}^P$	$\alpha_{inc}^D$
Voigt (V)	1	1
Reuss (R)	$\frac{K_m}{c K_m + (1-c) K_{inc}}$	$\frac{G_m}{c G_m + (1-c) G_{inc}}$
Hashin-Shtrikman (SH) (oszacowanie górne)	$\frac{a_{i,max}^P}{c a_{i,max}^P + (1-c) a_{m,max}^P}$	$\frac{a_{i,max}^D}{c a_{i,max}^D + (1-c) a_{m,max}^D}$
Hashin-Shtrikman (HS) (oszacowanie dolne)	$\frac{a_{i,min}^P}{c a_{i,min}^P + (1-c) a_{m,min}^P}$	$\frac{a_{i,min}^D}{c a_{i,min}^D + (1-c) a_{m,min}^D}$
Mori-Tanaka (MT)	$\frac{a_{i,m}^P}{c a_{i,m}^P + (1-c)}$	$\frac{a_{i,m}^D}{c a_{i,m}^D + (1-c)}$
Samozgodny (SC)	$a_{i,eff}^P$	$a_{m,eff}^D$

Notacja

$$a_{r,max}^X = a_r^X (\max (K_{inc}, K_m), \max (G_{inc}, G_m)) \quad a_{r,min}^X = a_r^X (\min (K_{inc}, K_m), \min (G_{inc}, G_m))$$

$$a_{r,m}^X = a_r^X (K_m, G_m), \quad a_{r,eff}^X = a_r^X (\bar{K}, \bar{G}) \text{ gdzie } X = P, D; r = i, m \text{ i:}$$

$$a_r^P (K, G) = \frac{K+K^*}{K_r+K^*}, \quad a_r^D (K, G) = \frac{G+G^*}{G_r+G^*}$$

$$K^* = K * (G) = \frac{4G}{3}, \quad G^* = G * (K, G) = G \frac{9G+8K}{6(K+2G)}$$

### 2.3.5 Przewidywania modeli mikromechanicznych dla kompozytu dwufazowego z doskonałym połączeniem faz

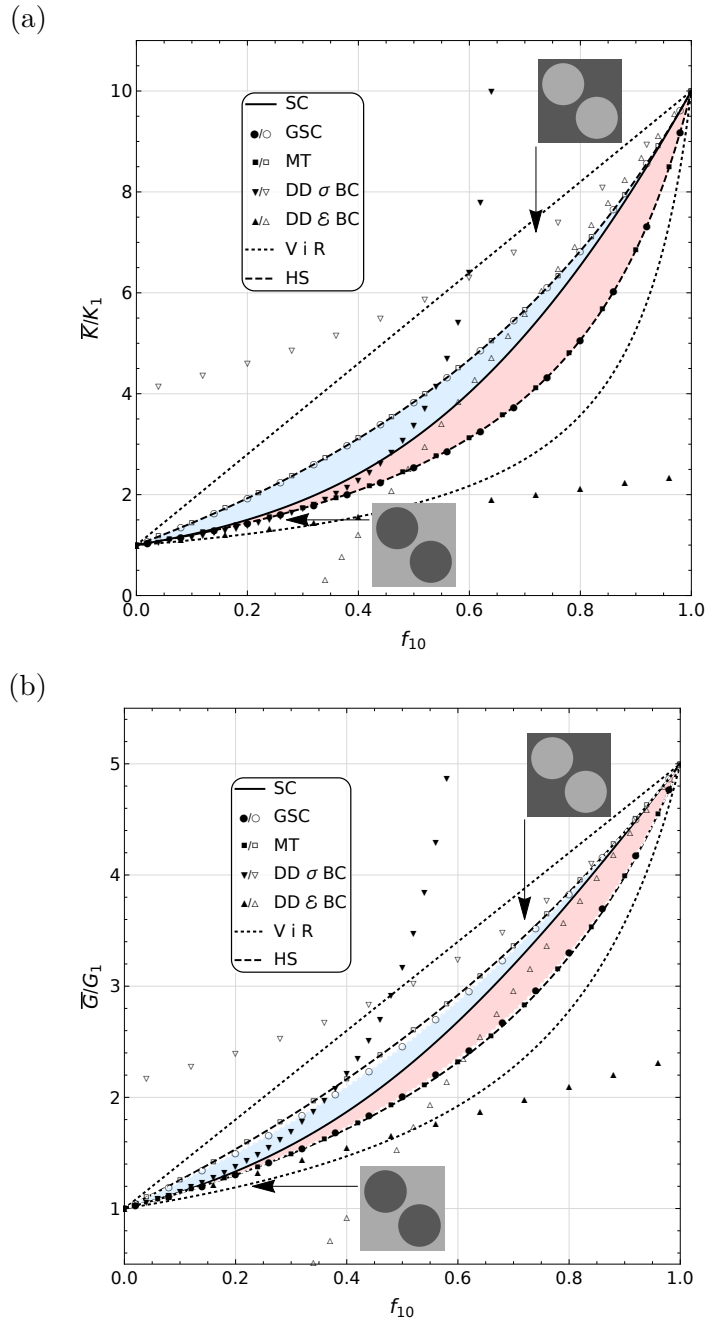
Analogicznie jak dla zagadnienia homogenizacji przewodności cieplnej kompozytu przewidywania efektywnych sprężystych modułów otrzymane podejściem MRP znajdują się między SC, a GSC (Rys.2.12) i dla ustalonego  $f_{inc}$  wyniki MRP zależą od wartości parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  (Rys.2.13).

Na Rys.2.12 pokazano stosunek efektywnego (a) modułu objętościowego  $\bar{K}$  lub (b) modułu ścinania  $\bar{G}$  do parametrów materiałowych fazy miękkiej  $(K_1, G_1) = (1, 1)$ , vs. udział objętościowy fazy twardej  $f_{10}$  o  $K_{10} = 10$  i  $G_5 = 5$ . Przewidywania MRP dla konfiguracji kompozytu o twardych wtrąceniach  $(K_{inc}, G_{inc}) = (10, 5)$  i miękkiej osnowie  $(K_m, G_m) = (1, 1)$  znajdują się w jasnoczerwonym polu,  $SC \geq MRP \geq GSC$ . Dla odwrotnej konfiguracji kompozytu, o miękkich wtrąceniach  $(K_{inc}, G_{inc}) = (1, 1)$  i dobrze przewodzącej osnowie  $(K_m, G_m) = (10, 5)$ , przewidywania MRP znajdują się w jasnoniebieskim polu,  $GSC \geq MRP \geq SC$ . Przewidywania GSC, MT oraz odpowiednie oszacowanie HS są jednakowe dla przewidywań modułu objętościowego  $\bar{K}$ , natomiast  $GSC \neq MT$  dla efektywnego modułu ścinania  $\bar{G}$ . Modele DD, GSC i MT rozróżniają konfigurację kompozytu.

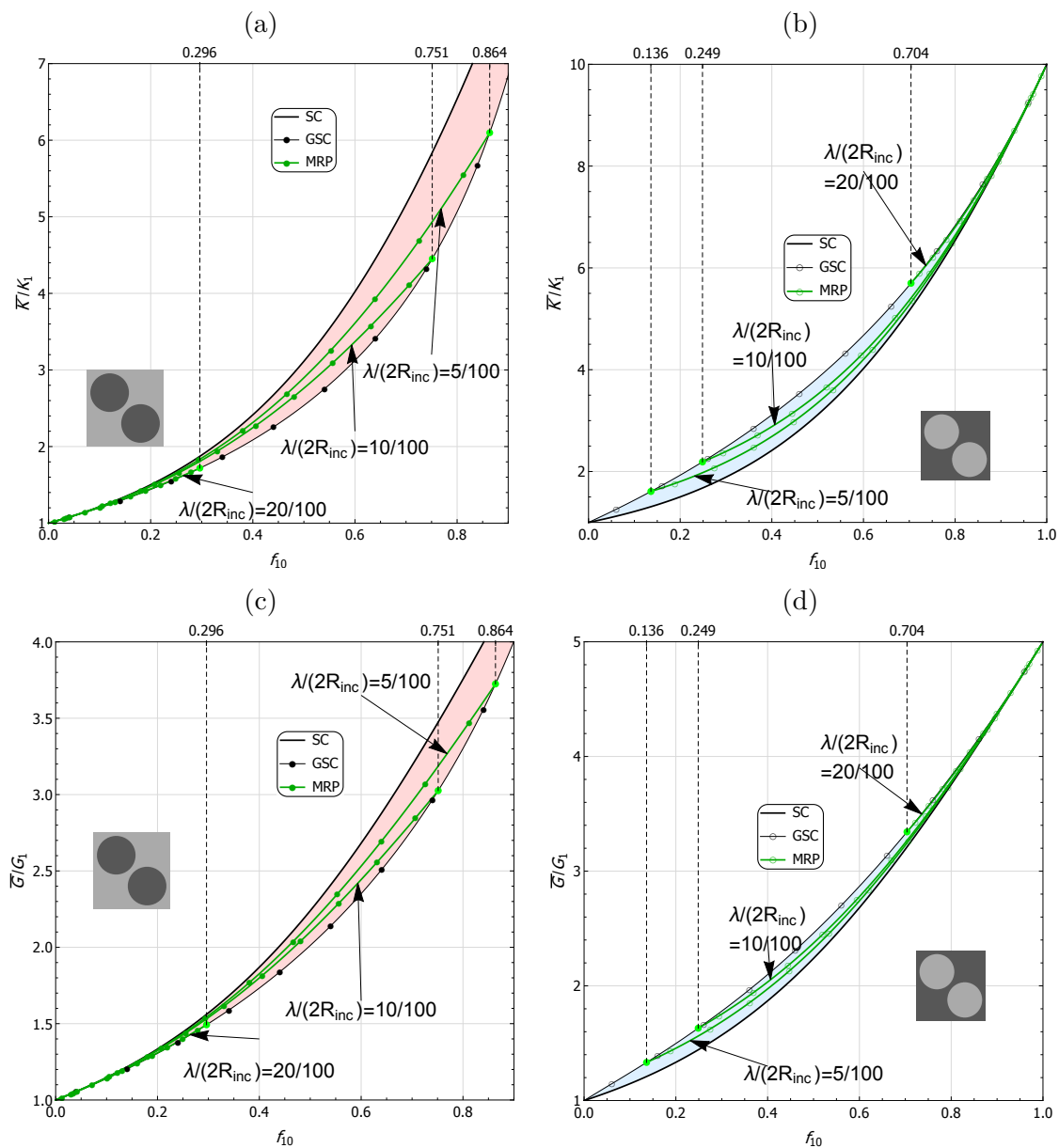
Podpunkty (a) i (b) Rys.2.13 przedstawiają wpływ parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  na efektywne parametry kompozytu dwufazowego. Zaprezentowano rezultaty dla dwóch odwrotnych konfiguracji : miękkie wtrącenia w twardej osnowie (a) i (c) oraz twarde wtrącenia rozproszone w miękkiej osnowie podpunkty (b) i (d). Podobnie jak dla zagadnienia przewodzenia ciepła zgrupowanie wtrąceń w klastrach, innymi słowy niski współczynnik upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  dla jednakowego udziału objętościowego wtrąceń, prowadzi do wzrostu sztywności w przypadku twardego zbrojenia kompozytu i odwrotnie dla miękkich wtrąceń ( $MRP \rightarrow SC$  dla  $\bar{\lambda}/(2R_{inc}) \rightarrow 0$ ). Oczywiście, gdy  $\bar{\lambda} = 0$  rezultat MRP jest tożsamy z rezultatem SC, który nie rozróżnia konfiguracji kompozytu: miękkie wtrącenia w twardej osnowie lub odwrotnie. Warto zaznaczyć, że w przypadku obu limitów upakowania ( $f_{inc} \rightarrow 0$  i  $f_{inc} \rightarrow 1$ ) obie krzywe SC i GSC są styczne do siebie.

## 2.4 Deformacja sprężysto-plastyczna kompozytu

Podejście MRP może być szczególnie użyteczne w modelowaniu nieliniowej odpowiedzi materiałów heterogenicznych, szczególnie kompozytów ceramiczno-metalowych ze sprężysto-plastyczną osnową i sprężystymi ceramicznymi wtrąceniami. W takich kompozytach w zakresie zaawansowanego płynięcia plastycznego należy rozwiązać problem odpowiadający przypadkowi sztywnych inkluzji w podatnej matrycy. Zastosowanie podejścia MRP w kontekście nieliniowego zachowania materiałów dla zakresu sprężysto-plastycznego wymaga poprawnej linearyzacji stosowanych relacji konstytutywnych. W przypadku modeli średniego pola, które nie uwzględniają efektów skali i przestrzennego rozłożenia komponentów (np. MT, SC), w literaturze można w tym względzie



Rysunek 2.12: Efektywny (a) moduł objętościowy  $\bar{K}$  lub (b) moduł ścinania  $\bar{G}$  vs. udział objętościowy fazy twardej  $f_{10}$  o  $(K_{10}, G_5) = (10, 5)$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MT – model Mori-Tanaka, DD – model rozproszonych wtrąceń dla naprężeniowych  $\sigma$  i przemieszczeniowych  $\varepsilon$  warunków brzegowych, V i R – oszacowania graniczne Voigta i Reussa, HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-Shtrikmana. MRP dla  $(K_{inc}, G_{inc}) = (10, 5)$  i  $(K_m, G_m) = (1, 1)$ :  $SC \geq MRP \geq GSC$  (jasnoczerwone pole), dla  $(K_{inc}, G_{inc}) = (1, 1)$  i  $(K_m, G_m) = (10, 5)$ :  $GSC \geq MRP \geq SC$  (jasnoniebieskie pole). W (a)  $\bar{K}$  :  $GSC=MT$ , w (b)  $\bar{G}$  :  $GSC \neq MT$ .



Rysunek 2.13: (a) i (b) Efektywny moduł objętościowy  $\bar{K}$  (c) i (d) moduł ścinania  $\bar{G}$  vs. udział objętościowy fazy twardej  $f_{10}$  o  $K_{10} = 10$  i  $G_5 = 5$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji kompozytu. W przewidywaniach MRP parametr upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  przyjęto jako stały: 5/100, 10/100 lub 20/100. Parametry materiałowe kompozytu: (a) i (c)  $(K_{inc}, G_{inc}) = (10, 5)$  oraz  $(K_m, G_m) = (1, 1)$ , (b) i (d)  $(K_{inc}, G_{inc}) = (1, 1)$  oraz  $(K_m, G_m) = (10, 5)$ .



znaleźć następujące propozycje mające swe źródło w schemacie przyrostowym zaproponowanym przez Hilla w 1965 roku [53]: linearyzacja przyrostowa styczna, sieczna, nieprzyrostowa styczna, asymptotyczna styczna, addytywna styczna oraz sekwencyjna, [49],[50]. Poprawność poszczególnych schematów linearyzacji była przynajmniej częściowo zweryfikowana przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej MES w [49],[51]. W niniejszym pracy zaadaptowano schemat linearyzacji przyrostowej stycznej oraz siecznej w sposób opisany w publikacji [75].

#### 2.4.1 Adaptacja modeli średniego pola do opisu nieliniowej odpowiedzi kompozytu

Ilościowe oszacowanie efektywnych właściwości kompozytów w zakresie sprężysto-plastycznym jest uzależnione od zastosowanego schematu linearyzacji i przyjętej metody pola średniego. W celu skorzystania z modeli mikro-makro pola średniego, sformułowanych w kontekście właściwości liniowych, przyjęto linearyzację przyrostową zaproponowaną w [53]. W zależności od definicji aktualnego tensora sztywności rozważamy dwa warianty procedury linearyzacji: styczny ( $\mathbb{L}^t$ ) [53] lub sieczny ( $\mathbb{L}^s$ ) [54]. W obu podejściach przy każdym przyroście odkształcenia stosuje się w metodzie pola średniego aktualny tensor sztywności sprężysto-plastycznej stosując odpowiednio zlinearyzowane zależności konstytutywne dla metody stycznej (oznaczenie  $t$ ) lub siecznej (oznaczenie  $s$ ):

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{L}^t \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad , \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbb{L}^s \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \quad . \quad (2.34)$$

W niniejszej pracy oszacowano efektywną sprężysto-plastyczną odpowiedź kompozytów ceramiczno-metalowych ze sprężysto-plastyczną osnową i sprężystymi wtrąceniami ceramicznymi (ang. Metal Matrix Composite, MMC). Fazę wtrąceń przyjęto jako izotropową i liniowo sprężystą o parametrach materiałowych ceramiki ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). Jako kryterium uplastycznienia metalowej osnowy ( $m$ ) przyjęto warunek Hubera-Misesa oraz założono stowarzyszone prawo płynięcia:

$$f(\boldsymbol{\sigma}_m) = \sqrt{\frac{3}{2} \boldsymbol{\sigma}'_m \cdot \boldsymbol{\sigma}'_m} - Y(\varepsilon_{eq}^p) \leq 0, \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \lambda \frac{3\boldsymbol{\sigma}'_m}{2Y}, \quad (2.35)$$

w którym  $\lambda$  to mnożnik plastyczny spełniający zależność  $\lambda \geq 0$  oraz  $\boldsymbol{\sigma}' = \mathbb{I}^D \cdot \boldsymbol{\sigma}$  to część dewiatorowa tensora naprężenia. Dodatkowo mnożnik plastyczny wraz z funkcją  $f(\boldsymbol{\sigma}_m)$  spełniają warunki konsystencji:

$$\lambda f = 0 \quad \wedge \quad \lambda \dot{f} = 0 \quad , \quad (2.36)$$

które są warunkami koniecznymi na niezerowy przyrost odkształcenia plastycznego. Przyjęto potęgowe wzmocnienie izotropowe dla funkcji  $Y(\varepsilon_{eq}^p)$ :

$$Y(\varepsilon_{eq}^p) = Y_0 + h (\varepsilon_{eq}^p)^n, \quad \dot{\varepsilon}_{eq}^p = \sqrt{\frac{2}{3} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p} = \lambda. \quad (2.37)$$

Parametry materiałowe faz kompozytu są wypisane w tabeli 2.3.

Faza	Wtrącenia	Osnowa
Moduł Younga, $E$ [GPa]	400	75
Współczynnik Poissona, $\nu$	0.2	0.3
Początkowa granica plastyczności, $Y_0$ [MPa]	-	75
Moduł umocnienia, $h$ [MPa]	-	416
Wykładnik, $n$	-	0.3895

Tabela 2.3: Przyjęte parametry materiałowe faz kompozytu MMC (ang. Metal Matrix Composite) ze sprężysto-plastyczną osnową i sprężystymi wtrąceniami.

Przyrostowa relacja konstytutywna osnowy ma postać:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}_m = \mathbb{L}_m^e \cdot (\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m - \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p), \quad (2.38)$$

w której  $\mathbb{L}_m^e$  jest izotropowym tensorem sprężystości osnowy zdefiniowanym przez moduły  $G_m$  i  $K_m$ .

Po wykorzystaniu w Eq.2.38 równań 2.35-2.37 dla założonej osnowy styczny tensor sztywności sprężysto-plastycznej  $\mathbb{L}_m^t$  z Eq.2.34 wyraża się wzorem:

$$\mathbb{L}_m^t = 3K_m \mathbb{I}^P + 2G_m^t \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right) \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} + 2G_m \left( \mathbb{I}^D - \mathbf{N} \otimes \mathbf{N} \right), \quad (2.39)$$

w którym:

$$G_m^t \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right) = G_m \frac{h \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right)}{h \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right) + 3G_m}, \quad h \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right) = \frac{\partial Y \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p}, \quad \mathbf{N} = \frac{\boldsymbol{\sigma}_m}{\sqrt{\boldsymbol{\sigma}_m \cdot \boldsymbol{\sigma}_m}}. \quad (2.40)$$

Tensor drugiego rzędu  $\mathbf{N}$  jest wersorem części dewiatorowej tensora naprężenia  $\boldsymbol{\sigma}_m$  w przestrzeni naprężeń.

Należy zwrócić uwagę, że aktualny tensor sztywności sprężysto-plastycznej  $\mathbb{L}_m^t$  jest anizotropowy, nawet jeśli analizowany materiał jest izotropowy [35] [125]. Aby uniknąć nadmiernej sztywności odpowiedzi sprężysto-plastycznej kompozytu obserwowanej np w pracach [125],[35], tensor ten jest poddany izotropizacji  $\mathbb{L}_m^{t(iso)}$  [129] według schematu poniżej.

Gdy proces odkształcenia jest taki, że kierunek dewiatora odkształceń  $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m$  pozostaje stały i równy kierunkowi  $\mathbf{N}$  (co jest spełnione np. dla proporcjonalnej ścieżki obciążenia), możliwe jest następujące uproszczenie:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}_m = \mathbb{L}_m^t \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m = \mathbb{L}_m^{t(iso)} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m, \quad (2.41)$$

w którym  $\mathbb{L}_m^{t(iso)}$  jest izotropowym stycznym tensorem sztywności sprężysto-plastycznej zdefiniowanym następująco [35]:

$$\mathbb{L}_m^{t(iso)} = 3K_m \mathbb{I}^P + 2G_m^t \left( \boldsymbol{\epsilon}_{eq}^p \right) \mathbb{I}^D. \quad (2.42)$$

Należy zauważyć, że dla proporcjonalnej ścieżki obciążenia moduł  $G_m^t$  może być również wyznaczony ze wzoru:

$$2G_m^t = \frac{\|\dot{\boldsymbol{\sigma}}_m\|}{\|\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m\|} = \frac{\sqrt{\dot{\boldsymbol{\sigma}}_m \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}}_m}}{\sqrt{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_m}}. \quad (2.43)$$

W dalszej części pracy wykorzystano wariant styczny linearyzacji, a aktualny tensor sztywności sprężysto-plastycznej  $\mathbb{L}_m^t$  podlega izotropizacji zgodnie z Eq.2.42.

Dla siecznego wariantu linearyzacji równań konstytutywnych aktualny tensor sztywności sprężysto-plastycznej osnowy dla proporcjonalnej ścieżki obciążenia jest izotropowy i zdefiniowany następująco:

$$\mathbb{L}_m^{(iso)} = 3K_m \mathbb{I}^P + 2G_m^s \left( \boldsymbol{\varepsilon}_{eq}^p \right) \mathbb{I}^D \quad , \quad (2.44)$$

gdzie

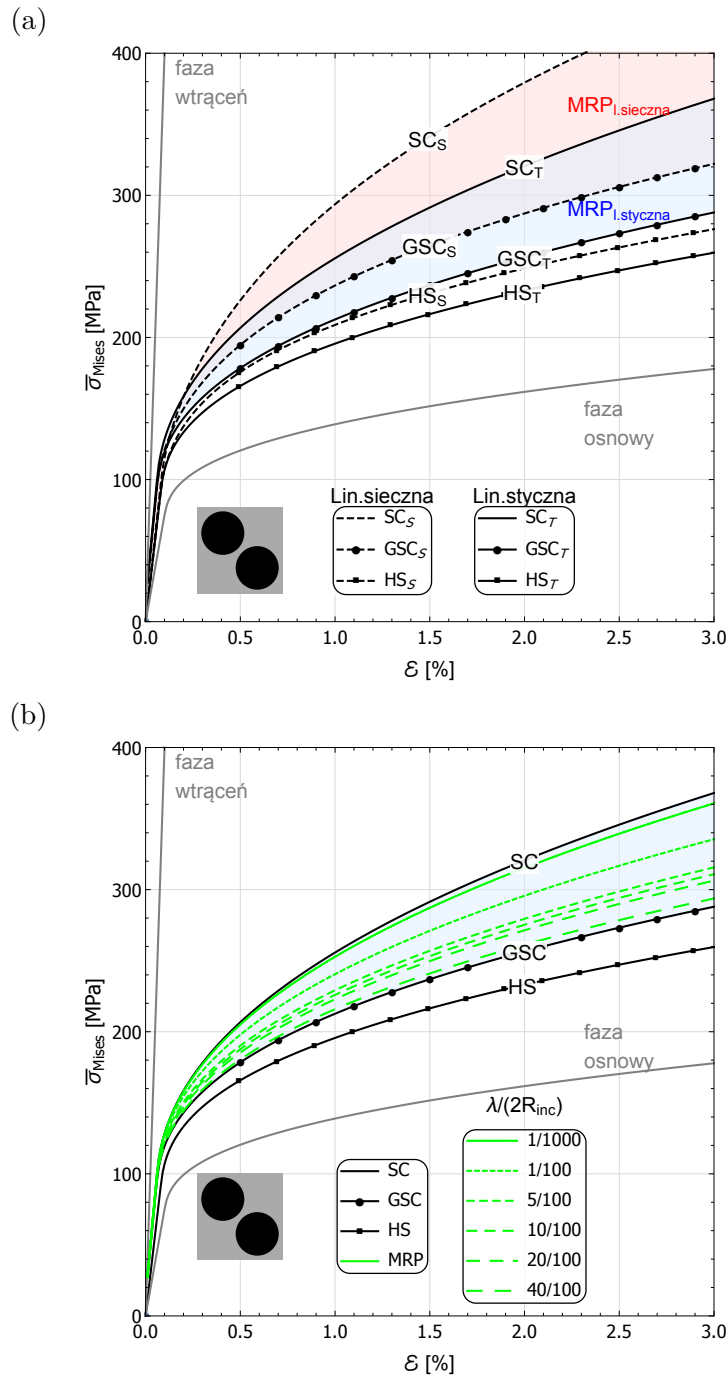
$$2G_m^s \left( \boldsymbol{\varepsilon}_{eq}^p \right) = \frac{\|\boldsymbol{\sigma}'_m\|}{\|\boldsymbol{\varepsilon}'_m\|} = \frac{\sqrt{\boldsymbol{\sigma}'_m \cdot \boldsymbol{\sigma}'_m}}{\sqrt{\boldsymbol{\varepsilon}'_m \cdot \boldsymbol{\varepsilon}'_m}} \quad . \quad (2.45)$$

Algorytm wyznaczania efektywnej odpowiedzi materiału sprężysto-plastycznego modelami pola średniego opiera się na procedurze opisanej w podrozdziale 2.3.3, w której aktualny tensor sztywności osnowy na danym kroku obliczany jest przy wykorzystaniu linearyzacji przyrostowej. Aktualny tensor sztywności, wyrażony wzorami 2.42 i 2.44 odpowiednio dla wariantu stycznego i siecznego, zależy od aktualnego zakumulowanego odkształcenia plastycznego  $\boldsymbol{\varepsilon}_{eq}^p$ . W wariancie stycznym algorytm stosuje przyrosty naprężenia i odkształcenia, natomiast w wariancie siecznym aktualny tensor naprężenia i odkształcenia są wystarczające do wyznaczenia  $\mathbb{L}_m^s$ . Dokładny opis zaadoptowanej w badaniach procedury linearyzacji znajduje się w publikacji [75].

#### 2.4.2 Przewidywania modeli mikromechanicznych dla kompozytu dwufazowego z doskonałym połączeniem faz

Wykorzystując procedurę linearyzacji opisaną w poprzednim rozdziale przeprowadzono symulację testu izochorycznego rozciągania (Eq.3.9.c w podrozdziale 3.2) kompozytu MMC o sprężysto-plastycznej osnowie i sprężystych wtrąceniach. Przyjęte parametry materiałowe zostały wypisane w tabeli 2.3. Udział objętościowy fazy wtrąceń wynosił  $f_{inc} = 30\%$ . Oszacowania zmiany ekwiwalentnego naprężenia Hubera-Misesa w funkcji odkształcenia w kierunku rozciągania, otrzymane przy wykorzystaniu poszczególnych modeli mikromechanicznych, przedstawiono na Rys.2.14.

Na obu wykresach z Rys.2.14 kolorem szarym zaznaczono odpowiedź poszczególnych faz kompozytu MMC. Na wykresie 2.14.a porównano oszacowaną odpowiedź kompozytu w zależności od przyjętego wariantu linearyzacji. Odpowiedź kompozytu dla linearyzacji siecznej (indeks  $S$ ) jest sztywniejsza niż dla linearyzacji stycznnej (indeks  $T$ ). Dla tego samego schematu linearyzacji oszacowanie otrzymane modelem MRP znajduje się między SC a GSC analogicznie jak dla wcześniejszych wyników dotyczących przewodnictwa cieplnego i właściwości sprężystych kompozytów. Wyniki otrzymane przy wykorzystaniu modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu przedstawiono na wykresie 2.14.b. Wraz z dążeniem parametru upakowania do zera odpowiedź MRP dąży do oszacowania SC. Odwrotnie, gdy parametr upakowania dąży do wartości maksymalnej (dla  $f_{inc} = 30\%$  to około 0.489), wtedy oszacowanie MRP będzie równe rezultatom schematu GSC.



Rysunek 2.14: Oszacowanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej kompozytu MMC (Tab.2.3) o  $f_{inc} = 30\%$  w teście izochorycznego rozciągania: napężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa vs. składowa odkształcenia  $\epsilon$  w kierunku rozciągania. Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, HS – oszacowanie graniczne dolne Hashina-Shtrikmana, MRP – model morfologicznej reprezentacji kompozytu. (a) linearyzacja sieczna (indeks  $S$ ) i styczna (indeks  $T$ ), (b) linearyzacja styczna MRP dla różnych wartości parametru upakowania.

## Rozdział 3

# Homogenizacja numeryczna

Wzrost popularności homogenizacji numerycznej jest związany ze wzrastającą mocą obliczeniową komputerów. Homogenizacja numeryczna uwzględnia więcej cech rzeczywistej mikrostruktury materiału w porównaniu do tradycyjnych modeli analitycznych (np. model Mori-Tanaka, schemat samozgodny), które uwzględniają wąskie spektrum parametrów mikrostruktury. Jednak technika homogenizacji numerycznej ma swoje wady: wysoki koszt obliczeniowy, szczególnie dla zagadnień nieliniowych, oraz trudności związane z problemem zapewnienia reprezentatywności rozważanego elementu objętości kompozytu. Analizy kompozytów przeprowadzone za pomocą homogenizacji numerycznej są kompromisem między ich kosztem obliczeniowym, a prawidłową rekonstrukcją rzeczywistej mikrostruktury materiału [11]. Często dla materiałów kompozytowych stosowane są komórki jednostkowe z pojedynczą niejednorodnością [127]. Przy takich uproszczeniach przewaga tej techniki nad modelami mikromechanicznymi jest sporna.

W pracy doktorskiej homogenizacja numeryczna została przeprowadzona za pomocą metody elementów skończonych. Dyskretyzacja struktur na elementy skończone została zrealizowana za pomocą oprogramowania NetGen [58]. Analiza metodą elementów skończonych została wykonana w oprogramowaniu AceFEM [57]. W celu przeprowadzenia analiz MES wygenerowane o losowym rozkładzie wtrąceń próbki były dyskretyzowane za pomocą czworościennych, 10-węzłowych, elementów skończonych drugiego rzędu. Gęstość siatki była tak dobrana, że ponad dwukrotny wzrost liczby elementów między rzadszą siatką a faktycznie używaną powodował różnicę wyników mniejszą niż 1% w znacznej większości badanych mikrostruktur. Końcowa siatka zawierała od 40 do 100 tysięcy elementów, w zależności od udziału objętościowego wtrąceń, grubości warstwy międzyfazy i geometrii kompozytu (np. położenia wtrąceń). Generowano mikrostruktury kompozytów ze sferycznymi wtrąceniami o jednakowych promieniach wtrąceń. Zbadano dwa warianty położenia wtrąceń: losowy lub regularny. Najbardziej popularne systemy regularne to: prymitywny (prosty) (ang. Regular Cubic, skrót RC), przestrzennie centrowany (ang. Body-Centered Cubic, skrót BCC) i ściennie centrowany (ang. Face-Centered Cubic, skrót FCC), opisane w np. [59].

## 3.1 Losowe położenie wtrąceń

### 3.1.1 Reprezentatywny element objętości (RVE)

W homogenizacji numerycznej rozrzut oszacowań właściwości kompozytu o losowym położeniu wtrąceń zależy od stosunku wymiaru charakterystycznego w mikroskali (np. promień wtrąceń  $R_{\text{inc}}$  o zadanej objętości  $f_{\text{inc}}$ ) do wymiaru charakterystycznego w mesoskali (np. boku próbki kompozytu  $L$ , na którym zadane są warunki brzegowe). Reprezentatywny element objętości, niezależnie od warunków brzegowych, spełnia warunek Hilla [52]:

$$\overline{\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}} = \overline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overline{\boldsymbol{\varepsilon}}, \quad (3.1)$$

w którym  $\overline{(\cdot)} = 1/V \int_V (\cdot) dV$ , zaś  $\boldsymbol{\sigma}$  i  $\boldsymbol{\varepsilon}$  to odpowiednio pola naprężeń i odkształceń w elemencie. Wygenerowany fragment kompozytu jest reprezentatywnym elementem objętości (ang. Representative Volume Element, skrót RVE), gdy stosunek  $R_{\text{inc}}/L$  dąży do zera, tzn. mamy nieskończoną liczbę wtrąceń. Wynikiem homogenizacji numerycznej reprezentatywnego elementu objętości są efektywne właściwości kompozytu, które pozwalają oszacować makroskopową odpowiedź materiału heterogenicznego, zastępując go w analizie materiałem homogenicznym o efektywnych właściwościach [74].

Jeżeli stosunek  $R_{\text{inc}}/L$  jest skończony, tzn. mamy skończoną liczbę wtrąceń, to wygenerowany fragment kompozytu jest statystycznym elementem objętości (ang. Statistical Volume Element, skrót SVE). Otrzymane za pomocą homogenizacji numerycznej statystycznego elementu objętości właściwości kompozytu różnią się w zależności od próbki kompozytu, a ich rozrzut maleje wraz ze spadkiem  $R_{\text{inc}}/L$ . Wraz ze wzrostem liczby wtrąceń w elemencie, przy zadanej objętości fazy zbrojenia w kompozycie, wzrasta koszt homogenizacji numerycznej. W numerycznych badaniach stosuje się zatem statystyczne elementy objętości SVE będące rozsądnym kompromisem pomiędzy dokładnością, a czasem obliczeń w porównaniu do wyidealizowanych reprezentatywnych elementów objętości RVE [69]. Liczba wtrąceń  $n_{\text{inc}}$  w próbkach SVE powinna być na tyle duża, aby rozrzut wartości efektywnych właściwości dla SVE był niewielki dla różnych próbek i warunków brzegowych [70].

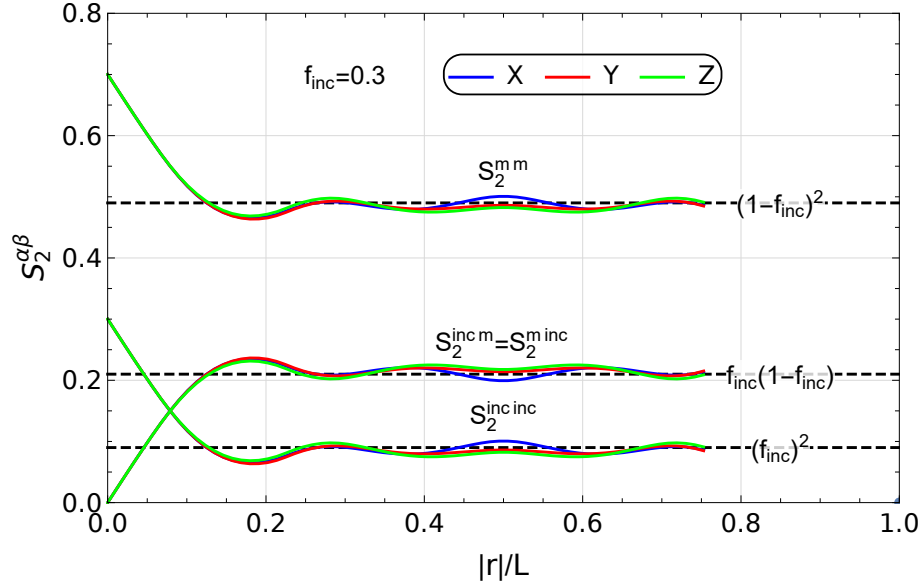
Aby określić wystarczającą liczbę wtrąceń  $n_{\text{inc}}$ , będącej właściwym kompromisem między czasem obliczeń a reprezentatywnością generowanych próbek, skorzystano z dwupunktowej funkcji prawdopodobieństwa (ang. two-point probability function)  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  opisanej w pracach [67] [124]. Wartość funkcji  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  to prawdopodobieństwo zdarzenia, że losowy punkt  $\mathbf{x}_1$  będzie należał do fazy  $\alpha$  oraz losowy punkt  $\mathbf{x}_2$  będzie należał do fazy  $\beta$ . Najczęściej przekształca się funkcję  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ , w której to  $\mathbf{r} = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ . Założono kompozyt dwufazowy:  $\alpha$  faza wtrąceń (inc),  $\beta$  faza osnowy (m). Dla statystycznie jednorodnego ośrodka dwupunktowa

funkcja  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$  dla  $(\alpha, \beta) = ((m, m), (inc, inc), (inc, m))$  ma następujące asymptoty:

$$\begin{aligned}
\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow 0} S_2^{(inc, inc)} &= f_{inc} \\
\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow 0} S_2^{(m, m)} &= 1 - f_{inc} \\
\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow 0} S_2^{(inc, m)} &= \lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow 0} S_2^{m \ inc} = 0 \\
\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} S_2^{(inc, inc)} &= (f_{inc})^2 \\
\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} S_2^{(m, m)} &= (1 - f_{inc})^2 \\
\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} S_2^{(inc, m)} &= \lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} S_2^{(m, inc)} = (1 - f_{inc}) f_{inc}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

w których  $f_{inc}$  to udział objętościowy wtrąceń.

Przeanalizowano za pomocą dwupunktowej funkcji prawdopodobieństwa statystyczne elementy objętości z różną liczbą wtrąceń  $n_{inc}$ . Wyniki uzyskane dla losowo generowanych kompozytów dwufazowych z  $n_{inc} = 50$  są zadowalające. Na Rys.3.1 zaprezentowano wyniki  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$  dla losowo wybranej struktury SVE z  $n_{inc} = 50$ .



Rysunek 3.1: Dwu-punktowa funkcja prawdopodobieństwa  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$  dla losowej struktury dwufazowego kompozytu z 50 wtrąceniami. Założony udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc} = 0.3$ . Przedstawiono wyniki funkcji  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$  w trzech kierunkach: X, Y i Z. Oś X przedstawia stosunek odległości między losowymi punktami  $\mathbf{r} = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$ , a rozmiarem próbki  $L$ .

Biorąc pod uwagę cel badania przestrzeni trzech zmiennych mikrostrukturalnych,  $f_{inc}$ ,  $t_{int}$  i  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ , czas analizy numerycznej MES SVE z  $n_{inc} = 50$  oraz otrzymane rezultaty dla  $S_2^{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ , spełniające asymptoty określone w Eq.3.2, w dalszej części pracy wszystkie analizowane losowe struktury SVE mają 50 wtrąceń. Liczba wtrąceń  $n_{inc} = 50$ , będąca kompromisem między czasem obliczeń a reprezentatywnością otrzymanych wyników, jest z powodzeniem stosowana również

w innych pracach, np. [51, 71]. Wygenerowane struktury z większą liczbą wtrąceń np. 90 są kosztowne obliczeniowo szczególnie w analizie nieliniowej odpowiedzi materiału heterogenicznego. Polepszenie efektywności symulacji dla skomplikowanych mikrostruktur można uzyskać stosując numeryczną homogenizację z metodą wielosiatkową (ang. multigrid homogenization) [89]. Wygenerowano około 100 próbek SVE z różnym parametrem upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  dla każdej zbadanej kombinacji  $f_{\text{inc}}$  i  $t_{\text{int}}$ . Efektywne właściwości kompozytu o zadanej kombinacji  $f_{\text{inc}}$  i  $t_{\text{int}}$  prezentujemy jako zbiór właściwości wygenerowanych SVE na wykresach w dalszej części pracy. W ten sposób można zaobserwować zarówno średnie tendencje, jak i rozproszenie wyników, dlatego zbiór co najmniej 100 wyników SVE o jednakowych parametrach  $f_{\text{inc}}$  i  $t_{\text{int}}$  w niniejszej pracy będzie uznawany jako odpowiadający RVE.

W homogenizacji numerycznej właściwości sprężysto-plastycznych materiałów kompozytowych w każdej strukturze SVE przyjęto periodyczne warunki brzegowe. Przesunięcie  $\mathbf{u}_A$  każdego węzła MES na boku  $A$  kostki SVE i jego periodycznego odpowiednika na przeciwległej stronie  $B$ ,  $\mathbf{u}_B$ , są związane równaniem:

$$\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B = \mathbf{E} \cdot (\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B), \quad (3.3)$$

gdzie  $\mathbf{x}_A$  i  $\mathbf{x}_B$  są początkowymi pozycjami węzłów oraz  $\mathbf{E}$  jest makroskopowym odkształceniem SVE równym lokalnemu odkształceniu uśrednionemu po objętości SVE  $\mathbf{E} = 1/V \int_V \boldsymbol{\varepsilon} dV$ .

Analogicznie jak dla analizy sprężysto-plastycznej w homogenizacji numerycznej przewodzenia ciepła materiałów kompozytowych w każdej strukturze SVE przyjęto periodyczne warunki brzegowe. Temperatura  $T_A$  każdego węzła MES na boku  $A$  kostki SVE i jego periodycznego odpowiednika na przeciwległej stronie  $B$ ,  $T_B$ , są związane równaniem:

$$T_A - T_B = \nabla T \cdot (\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B), \quad (3.4)$$

gdzie  $\mathbf{x}_A$  i  $\mathbf{x}_B$  są początkowymi pozycjami węzłów oraz  $\nabla T$  jest makroskopowym gradientem temperatury SVE.



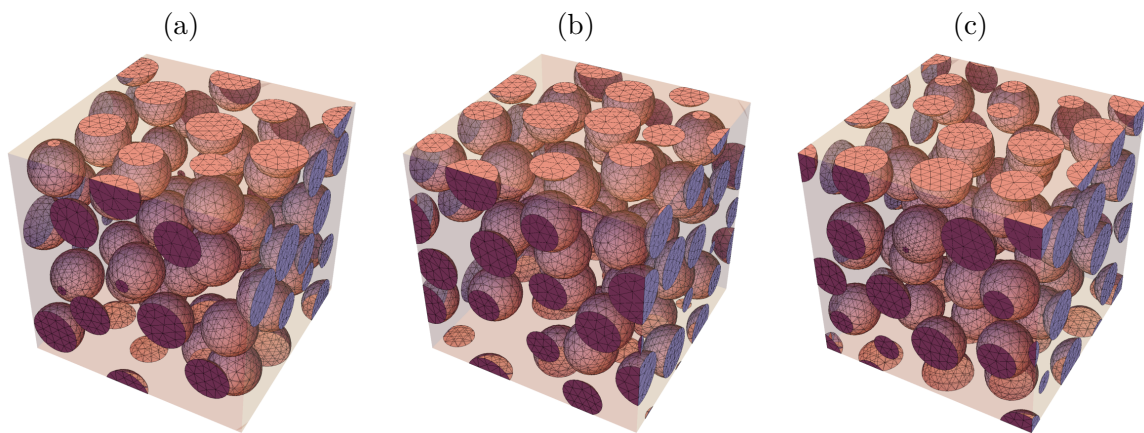
Rysunek 3.2: Schematyczna reprezentacja periodycznego położenia wtrąceń w elemencie.



Aby móc zrealizować okresowe warunki brzegowe Eq.3.3 lub Eq.3.4 generowana mikrostruktura kompozytu była okresowa. Przykład takiej mikrostruktury pokazano na Rys.3.2: wtrącenia przechodzące przez bok A komórki "pojawiają się" po przeciwległej stronie na boku B. Procedura generacji losowych mikrostruktur o okresowym położeniu wtrąceń jest opisana w następnym podrozdziale.

### 3.1.2 Procedura generacji RVE

W pracy wykonano homogenizację numeryczną SVE z różnym udziałem objętościowym wtrąceń  $f_{inc} = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$  o różnej średniej minimalnej odległości do najbliższego sąsiada  $\bar{\lambda}$  (Rys. 3.3).



Rysunek 3.3: Przykłady okresowych SVE z 50 losowo-umieszczonymi wtrąceniami o udziale objętościowym równym  $f_{inc} = 0.3$  (pokazano tylko siatkę MES wtrąceń). Parametr upakowania: (a)  $\bar{\lambda}/(2R_{inc}) = 0.007$ , (b)  $\bar{\lambda}/(2R_{inc}) = 0.111$  i (c)  $\bar{\lambda}/(2R_{inc}) = 0.272$ .

Losowe mikrostruktury były reprezentowane przez sześcian o wymiarach  $1 \times 1 \times 1$ , w którym wygenerowano strukturę wtrąceń powtarzającą się okresowo w objętości kompozytu. Wtrącenia "wychodząc" z jednej strony poza obrys sześcianu "kontynuowały" swoje położenie po przeciwnej stronie. Losowe umieszczanie wtrąceń wykonano wykorzystując oprogramowanie Yade [64] oraz Discrete Element Method (skrót DEM). Zaadoptowane podejście zostało opisane w [65], gdzie jest wykorzystane w badaniu dynamiki sprężystych sfer pozbawionych tarcia.

Procedura generacji losowych struktur jest następująca. Początkowe położenie wtrąceń jest generowane za pomocą algorytmu Random Sequential Addition (skrót RSA) [66, 67], który jest wbudowany w oprogramowanie Yade. RSA może zasadniczo generować losowe upakowania z udziałem objętościowym do około 0.38 [68], podczas gdy gęste upakowania są często trudne do osiągnięcia. Jednakże sfery okupujące 0.6 objętości sześcianu  $1 \times 1 \times 1$ , zajmują mniej niż 0.1 objętości sześcianu  $2 \times 2 \times 2$ , dlatego w pierwszym kroku procedury technika RSA generuje początkowe upakowanie wtrąceń w powiększonym sześcianie o wymiarach  $2 \times 2 \times 2$ . Liczba

sfer,  $n_{\text{inc}}$ , i ich promień,  $R_{\text{inc}}$ , odpowiada  $n_{\text{inc}} \frac{4}{3} \pi R_{\text{inc}}^3 = f_{\text{inc}}$ , gdzie  $f_{\text{inc}}$  jest założonym udziałem objętości wtrąceń w sześcianie  $1 \times 1 \times 1$ . Dodatkowo w fazie inicjacji są nadane losowe wektory prędkości każdej sferze, aby polepszyć proces losowego mieszania. Drugim krokiem jest procedura ściskania sześcianu  $2 \times 2 \times 2$ . Sześcian równomiernie kurczy się pchając sfery bliżej do siebie dopóki rozmiar  $1 \times 1 \times 1$  nie jest osiągnięty. W tym punkcie system zatrzymuje się i sprawdzany jest kształt wtrąceń, czy nie są one zdeformowane w końcowych pozycjach, to znaczy czy odległości między środkami sąsiadujących sfer są większe od sumy ich promieni. Procedura może generować nieściśnięte upakowania identycznych sfer o udziale objętości wtrąceń do około 0.65.

Opisana procedura opiera się na dynamicznym procesie przypominającym kompresję idealnego gazu w zamkniętym zbiorniku. Główną różnicą jest założenie, że geometria SVE jest periodyczna, co oznacza, że cząstki zamiast odbijać się od ścian pojemnika opuszczają go i ponownie wchodzi z przeciwnej strony. Przyjęto następujące założenia:

1. w fazie kompresji kostki trzy prostopadłe do siebie boki poruszają się równomiernie w kierunku jej środka powodując przepływ cząstek przez komórkę, co nie ma wpływu na właściwości wytwarzanych mikrostruktur;
2. cząsteczki podczas przechodzenia z jednej strony na stronę przeciwną utrzymują tę samą prędkość względną;
3. suma kierunków wektorów początkowych prędkości cząstek wynosi  $\mathbf{0}$ , gwarantuje to brak preferowanych kierunków dla prędkości początkowych;
4. prędkość kompresji kostki jest niewielka w porównaniu ze średnią prędkością cząstek;
5. brak tłumienia, dlatego system ulega kompresji adiabatycznej zwiększając gęstość cząstek i ich średnią energię kinetyczną.

Dla idealnego gazu w równowadze termodynamicznej, każde przestrzenne ułożenie cząstek w komórce, z określoną tolerancją, ma taką samą częstotliwość występowania w długim okresie czasu. Ponadto system jest bardzo wrażliwy na warunki początkowe, które różnią się od jednego przebiegu procedury do następnego. Można zatem przypuszczać, że gdy system jest zamrożony i konkretna realizacja SVE zostaje pobrana z jego stanu końcowego, istnieje równe prawdopodobieństwo uzyskania dowolnego dopuszczalnego układu cząstek. Próbkę z bardziej równomiernie rozmieszczonymi cząsteczkami są generowane częściej: jako zbiorowość zajmują większą domenę w przestrzeni prawdopodobieństwa niż układy o silnym skupieniu. Dodatkowo, gdy  $R_{\text{inc}} \ll 1$  i w komórce znajduje się wiele cząstek to losowa mikrostruktura jest w przybliżeniu izotropowa i ergodyczna.

Każde uruchomienie powyższej procedury, dla założonych  $f_{\text{inc}}$  i  $n_{\text{inc}}$ , generuje mikrostrukturę z pewną średnią odległości do najbliższego sąsiada  $\bar{\lambda}$ . Wartość  $\bar{\lambda}$  jest uzyskiwana numerycznie: wyznaczając wszystkie pary wtrąceń, znajdując najbliższego sąsiada każdego wtrącenia i ostatecznie uśredniając odległości najbliższych sąsiadów ze wszystkich wtrąceń. Wartość  $\bar{\lambda}$  różni

się w wygenerowanych mikrostrukturach i jak wspomniano wcześniej może przyjmować dowolną wartość z przedziału od 0 (każde wtrącenie jest w kontakcie z choćby jednym innym) i  $\bar{\lambda}_{max}(f_{inc}, n_{inc})$  (inkluzyje są maksymalnie rozproszone w objętości). W praktyce jednak próbki o wartości  $\bar{\lambda}$  zbliżonej do wartości granicznych są trudne do uzyskania bezpośrednio za pomocą procedury opisanej powyżej – w kategoriach probabilistycznych takie mikrostruktury są rzadkie spośród wszystkich możliwych wyników procedury. Dlatego stosuje się dwie proste modyfikacje, aby ułatwić generowanie mikrostruktur o względnie wysokim lub niskim  $\bar{\lambda}$ , tym samym aby ułatwić korzystanie z  $\bar{\lambda}$  jako kolejnego kontrolowanego parametru mikrostruktury.

Pierwsza modyfikacja procedury generuje mikrostruktury o wysokich wartościach  $\bar{\lambda}$ . Odbywa się to poprzez zwiększenie promienia każdej kuli o  $\lambda_*/2$ , zarówno w etapie umieszczenia sfer za pomocą RSA, jak i podczas późniejszej kompresji kostki. Wynikowa odległość między dowolnymi dwoma sferami wygenerowanymi przez procedurę wynosi co najmniej  $\lambda_*$ , z czego wynika, że  $\bar{\lambda} \geq \lambda_*$ . Innymi słowy,  $\bar{\lambda}$  jest zmuszone być równe lub większe niż dana wartość progowa  $\lambda_*$ , gdzie  $\lambda_* \leq \bar{\lambda}_{max}$ . Ta sama metoda jest stosowana do wytwarzania mikrostruktur z odległością między wtrąceniami wystarczającą, aby pomieścić interfazę o danej grubości.

Druga modyfikacja dotyczy generacji mikrostruktur o niskich wartościach  $\bar{\lambda}$ . Dokonuje się tego za pomocą klastrów (*clumps* w terminologii Yade) – grup sfer połączonych ze sobą jak atomy w cząsteczkach – zamiast pojedynczych sfer w procesie generowania RSA. Całe klastry są umieszczane losowo w powiększonym sześciennym  $2 \times 2 \times 2$  używając wbudowanej funkcji RSA w Yade, a następnie kompresowane przez ściany kostki. Każdy klaster działa jak jedna kula. Ruch i kolizje podczas fazy kompresji są obliczane dla całych klastrów, przy czym odległości między sferami w każdym klastrze są stałe. W przeprowadzonych symulacjach używa się najprostszych klastrów dwu-sferowych: zamiast umieszczania liczby  $n_{inc}$  sfer w objętości, umieszcza się  $n_{inc}/2$  par sfer. W każdej parze sfery są ustawione w odległości  $\lambda^*$ . Dlatego każde wtrącenie jest oddzielone od najbliższego sąsiada najwyżej o  $\lambda^*$ , z czego wynika, że  $\bar{\lambda} \leq \lambda^*$ . W ten sposób wymuszamy, aby  $\bar{\lambda}$  był równy lub mniejszy niż dana wartość progowa  $\lambda^* \geq 0$ .

### 3.2 Układy regularne wtrąceń - komórka jednostkowa

Najbardziej popularne uporządkowane systemy regularne to: prymitywny (prosty) (ang. Regular Cubic, skrót RC), przestrzennie centrowany (ang. Body-Centered Cubic, skrót BCC) i ściennie centrowany (ang. Face-Centered Cubic, skrót FCC), opisane np. w [59]. W dalszej części pracy na wykresach krzywe oznaczone RC, BCC i FCC są uzyskane dla losowego (izotropowego) układu położeń wtrąceń określonego przez następujące zależności  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  od  $f_{inc}$ :

$$\frac{\bar{\lambda}^{RC}}{2R_{inc}} = \left(\frac{\pi}{6f_{inc}}\right)^{1/3} - 1, \quad \frac{\bar{\lambda}^{BCC}}{2R_{inc}} = \left(\frac{\sqrt{3}\pi}{8f_{inc}}\right)^{1/3} - 1, \quad \frac{\bar{\lambda}^{FCC}}{2R_{inc}} = \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{6f_{inc}}\right)^{1/3} - 1. \quad (3.5)$$

Relacje z Eq.3.5 między parametrem upakowania i udziałem objętościowym wtrąceń odpowiadają periodycznemu układowi położeń wtrąceń o jednakowym promieniu  $R_{inc}$  rozmieszczonych jak

atomy w układach krystalograficznych: prymitywnym, ściennie centrowanym, przestrzennie centrowanym (Rys. 3.4). Przy założeniu, że wtrącenia na siebie nie nachodzą, maksymalne udziały objętościowe sferycznych wtrąceń, aby na siebie nie nachodziły, dla układów RC, BCC i FCC są równe:

$$f^{\text{RC}} = \frac{\pi}{6} \approx 0.52, \quad f^{\text{BCC}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.68, \quad f^{\text{FCC}} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.74. \quad (3.6)$$

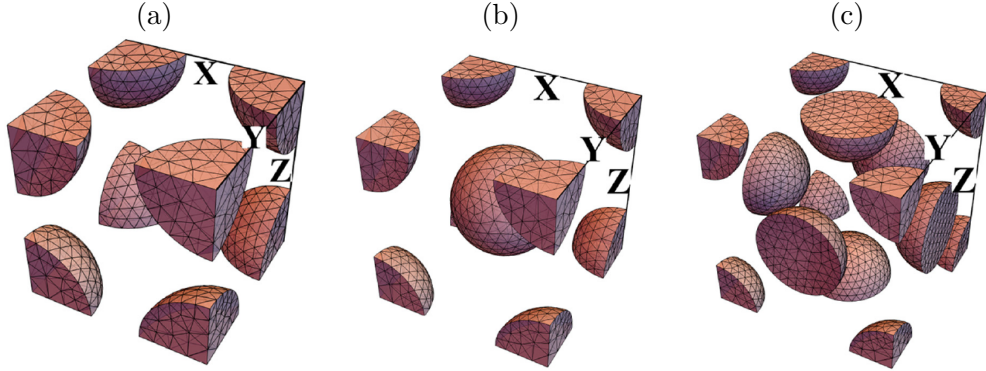
Komórka jednostkowa o ułożeniu wtrąceń zgodnie z którymś z systemów (Rys. 3.4) ma symetrię kubiczną. Konsekwentnie efektywny tensor sztywności  $\bar{\mathbb{L}}^{\text{uc}}$  komórki jednostkowej jest anizotropowym tensorem czwartego rzędu o symetrii kubicznej z trzema modułami Kelvina:  $3K$ ,  $2G_1$  i  $2G_2$  w postaci: [60, 61, 62]

$$\bar{\mathbb{L}}^{\text{uc}} = 3K\mathbb{I}^{\text{P}} + 2G_2(\mathbb{K} - \mathbb{I}^{\text{P}}) + 2G_1(\mathbb{I} - \mathbb{K}), \quad (3.7)$$

gdzie

$$\mathbb{K} = \sum_{k=1}^3 \mathbf{m}_k \otimes \mathbf{m}_k \otimes \mathbf{m}_k \otimes \mathbf{m}_k \quad (3.8)$$

i  $\mathbf{m}_k$  są głównymi osiami symetrii komórki jednostkowej (X,Y i Z na Rys. 3.4). Podprzestrzeń własna (ang. eigen-subspace) kolejno  $3K$ ,  $2G_1$  i  $2G_2$  jest: jednowymiarowa (przestrzeń stanu hydrostatycznego), trójwymiarowa i dwuwymiarowa (dwie ortogonalne podprzestrzenie stanu dewiatorowego).



Rysunek 3.4: Przykłady komórek jednostkowych z uporządkowanym położeniem wtrąceń o  $f_{\text{inc}} = 0.2$  (siatka MES widoczna dla fazy wtrąceń): (a) RC:  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) = 0.378$ , (b) BCC:  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) = 0.504$ , (c) FCC:  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) = 0.547$ .

Aby obliczyć każdy z modułów Kelvina przyjęto trzy zestawy periodycznych warunków brzegowych w przemieszczeniach (Eq.3.3) na trzy pary przeciwległych boków komórki jednostkowej. Zadane makroskopowe odkształcenia  $\mathbf{E}$  mają następującą reprezentację w bazie  $\mathbf{m}_k$ :

$$\mathbf{E}_1^{(\text{hyd})} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_1 & 0 \\ 0 & 0 & d_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_2^{(\text{dev})} = \begin{pmatrix} 0 & d_2 & 0 \\ d_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_3^{(\text{dev})} = \begin{pmatrix} d_3 & 0 & 0 \\ 0 & -d_3/2 & 0 \\ 0 & 0 & -d_3/2 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

gdzie  $d_i$  określa wielkość odkształcenia. Powyższe trzy tensory odkształcenia należą do trzech różnych podprzestrzeni tensora  $\bar{\mathbb{L}}^{\text{uc}}$  i w rezultacie całkowity tensor naprężenia, obliczony jako uśrednienie lokalnego naprężenia po objętości RVE,  $\boldsymbol{\Sigma} = 1/V \int_V \boldsymbol{\sigma} dV$ , ma taką samą strukturę jak tensory odkształcenia (3.9), mianowicie

$$\boldsymbol{\Sigma}_1^{(\text{hyd})} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_2^{(\text{dev})} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 & 0 \\ \sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_3^{(\text{dev})} = \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_3/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma_3/2 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Powyższe trzy analizowane przypadki pozwalają niezależnie wyznaczyć trzy moduły Kelvina z relacji

$$3K = \frac{\sigma_1}{d_1}, \quad 2G_1 = \frac{\sigma_2}{d_2}, \quad 2G_2 = \frac{\sigma_3}{d_3}. \quad (3.11)$$

W pracy doktorskiej wyniki homogenizacji numerycznej są zestawione z przewidywaniami modeli analitycznych, w znacznej większości odpowiednimi dla izotropowych kompozytów charakteryzowanych modulem objętościowym i modulem ścinania właściwym dla dowolnego odkształcenia dewiatorowego. Tensor sztywności o symetrii kubicznej ma zaś dwa moduły różne dla odkształcenia dewiatorowego należące do dwóch podprzestrzeni stanów własnych. W celu porównania wyników homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych z modelami mikromechanicznymi właściwymi dla materiałów izotropowych, zastosowano następującą metodę uśredniania [55]. Założono, że kompozyt jest polikryształem skomponowanym z różnie zorientowanych ziaren, charakteryzujących się uporządkowanym położeniem wtrąceń wewnątrz nich. Dla polikryształów z losowym rozkładem orientacji ziarn mogą być zastosowane klasyczne metody przewidywania [63] efektywnego modułu objętościowego i ścinania takich polikryształów na podstawie trzech modułów komórki jednostkowej. Niezależnie od schematu uśredniania, w przypadku symetrii kubicznej pojedynczego ziarna efektywny moduł objętościowy jest równy lokalnemu, stąd  $\bar{K} = K$ . Dolna i górna granica (odpowiednio Reussa i Voigta) efektywnego modułu ścinania  $\bar{G}$  ma postać:

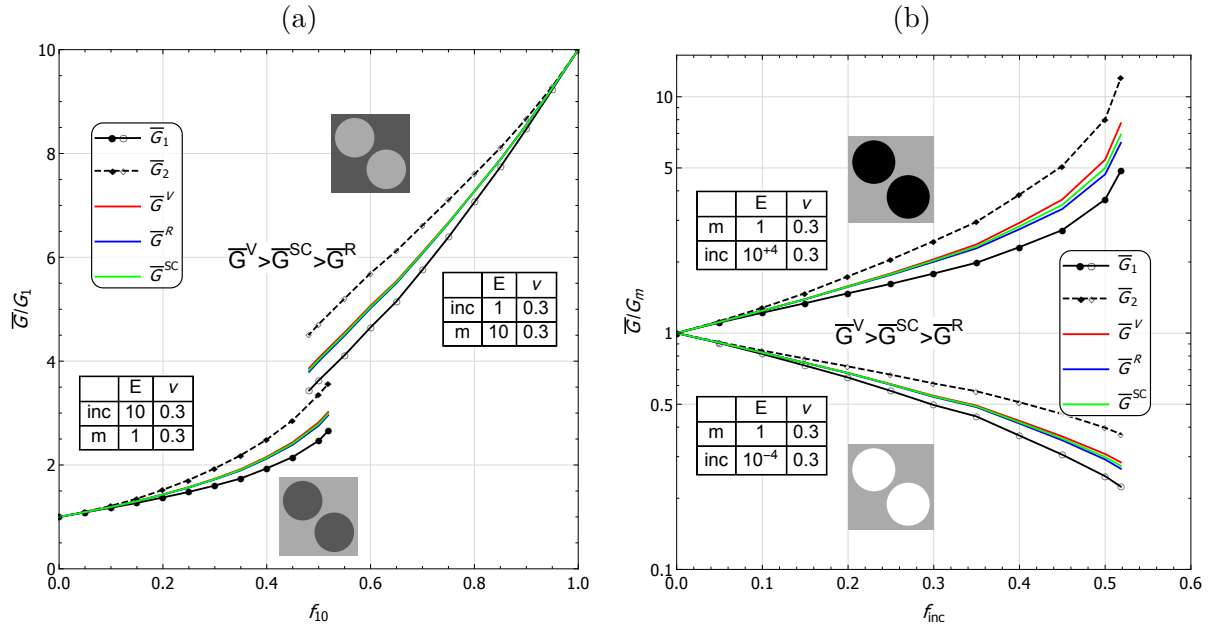
$$\bar{G}^{\text{R}} = \frac{5G_1G_2}{2G_1 + 3G_2}, \quad \bar{G}^{\text{V}} = \frac{1}{5}(3G_1 + 2G_2). \quad (3.12)$$

Efektywny moduł ścinania oszacowany za pomocą schematu samozgodnego  $\bar{G}^{\text{SC}}$  może być wyznaczony z równania wielomianowego trzeciego stopnia [53, 63] postaci:

$$8(\bar{G}^{\text{SC}})^3 + (9K + 4G_2)(\bar{G}^{\text{SC}})^2 - 3G_1(4G_2 + K)\bar{G}^{\text{SC}} - 6G_1G_2K = 0. \quad (3.13)$$

Przeprowadzono analizę metod uśredniania: Voigta, Reussa i schematem samozgodnym, dla wszystkich trzech układów regularnych z różnym udziałem objętościowym wtrąceń i dla różnych parametrów materiałowych faz. Wyniki uśredniania ( $\bar{G}^{\text{R}}, \bar{G}^{\text{SC}}, \bar{G}^{\text{V}}$ ) komórki jednostkowej z układem RC przedstawiono na wykresie 3.5 jako przykład. Na podstawie przeprowadzonych badań stwierdzono niewielką różnicę między wymienionymi metodami uśredniania, dlatego w

dalszej części pracy efektywny moduł ścinania komórek jednostkowych jest obliczony metodą uśredniania Voigta  $\bar{G} = \bar{G}^V$ .



Rysunek 3.5: Efektywne moduły ścinania  $\bar{G}_1$  i  $\bar{G}_2$  dla komórki jednostkowej RC obliczone za pomocą homogenizacji numerycznej. Zaprezentowano uśrednienie Voigta  $\bar{G}^V$  (Eq. 3.12.1), Reussa  $\bar{G}^R$  (Eq. 3.12.2) i schematem samozgodnym  $\bar{G}^{SC}$  (Eq. 3.13). (a) Kompozyt dwufazowy z fazą twardą i miękką:  $E_{twarda}/E_{miękka} = 10$  oraz  $\nu_{twarda} = \nu_{miękka} = 0.3$ , (b) kompozyt ze sztywnymi wtrąceniami lub pustkami ( $\nu_m = 0.3$ ), oś Y w skali logarytmicznej.

Tensor przewodności cieplnej układów regularnych RC, BCC i FCC jest izotropowy  $\mathcal{K} = k \mathbf{I}$ , dlatego wystarczy wykonanie homogenizacji numerycznej dla wyznaczenia współczynnika przewodności cieplnej komórki jednostkowej przy założeniu gradientu temperatury  $\nabla T$  w jednym kierunku np. X zgodnie z procedurą opisaną w poprzedniej sekcji (Eq.3.4).

## Rozdział 4

# Weryfikacja zaproponowanych modeli mikromechanicznych

### 4.1 Kompozyt dwufazowy z doskonałym połączeniem faz

W tym podrozdziale porównano oszacowania efektywnych parametrów materiałowych dwufazowych kompozytów za pomocą modeli mikromechanicznych oraz homogenizacji numerycznej w zależności od udziałów objętościowych faz kompozytu.

Efektywne parametry materiałowe: współczynnik przewodzenia ciepła (Rys.4.1.a i Rys.4.2), moduł objętościowy i moduł ścinania (Rys.4.1.b i Rys.4.3), oszacowano dla kompozytu złożonego z dwóch faz o następujących parametrach:

- właściwości mechaniczne: faza o wysokiej sztywności sprężystej (nazywanej dalej "twardą")  $(K_{10}, G_5) = (10, 5)$ , faza o niskiej sztywności sprężystej (nazywana dalej "miękką")  $(K_1, G_1) = (1, 1)$ ,
- właściwości termiczne: faza słabo przewodząca ciepło  $k_1 = 1$ , faza dobrze przewodząca ciepło  $k_{10} = 10$ .

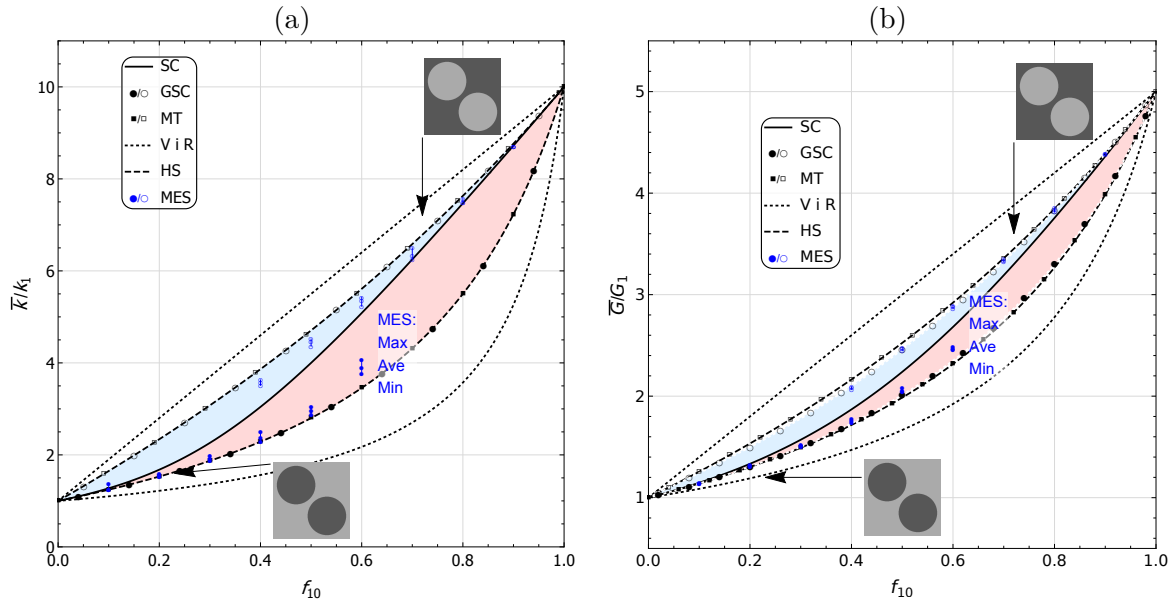
Zbadano dwie konfiguracje kompozytu:

- faza polepszająca parametry materiałowe  $f_{10}$  – wyższe wartości modułów  $K$  i  $G$  lub współczynnika  $k$  – jest fazą ciągłą (osnową), natomiast fazą rozproszoną (wtrącenia) jest faza o gorszych parametrach materiałowych  $f_1$  – niższe wartości modułów  $K$  i  $G$  lub współczynnika  $k$ ,
- faza polepszająca parametry materiałowe  $f_{10}$  jest fazą rozproszoną (sferyczne wtrącenia), natomiast faza o gorszych parametrach materiałowych  $f_1$  jest osnową w kompozycie.

W drugim przypadku kompozyt jest zbrojony wtrąceniami. Należy podkreślić, że zagadnienia oszacowania efektywnych modułów sprężystości i efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła należy traktować osobno. W rzeczywistości faza o wyższych wartościach modułów  $K$  i  $G$  może

się charakteryzować niższym współczynnikiem  $k$  niż druga faza (np. kompozyty z wtrąceniami  $\text{Al}_2\text{O}_3$  w osnowie metalicznej).

Na rysunku 4.1 wyniki homogenizacji numerycznej MES dotyczą statystycznych elementów objętości SVE, w których znajdowało się 50 sferycznych wtrąceń o periodycznym położeniu. Oś X wykresów to udział objętościowy  $f_{10}$  fazy dobrze przewodzącej ciepło (Rys.4.1.a) lub fazy twardej (Rys.4.1.b). Na wykresie 4.1 zaprezentowano skrajne wyniki SVE: maksymalną i minimalną, oraz wartość średnią z wszystkich 90-100 realizowanych SVE dla danego  $f_{10}$ . Zaobserwowano niewielką rozbieżność wyników SVE, które znajdują się między oszacowaniami GSC i SC.



Rysunek 4.1: Kompozyt dwufazowy: (a)  $k_{10} = 10$  i  $k_1 = 1$ , (b)  $(K_{10}, G_5) = (10, 5)$  oraz  $(K_1, G_1) = (1, 1)$ . (a) Efektywny współczynnik przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  vs. udział objętościowy fazy dobrze przewodzącej ciepło  $f_{10}$ . (b) Efektywny moduł ścinania  $\bar{G}$  vs. udział objętościowy fazy twardej  $f_{10}$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MT – model Mori-Tanaka, V i R – oszacowania graniczne Voigta i Reussa, HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-Shtrikmana, MES – homogenizacja numeryczna SVE: maksymalna, średnia i minimalna wartość z wygenerowanych mikrostruktur dla danego  $f_{10}$ .

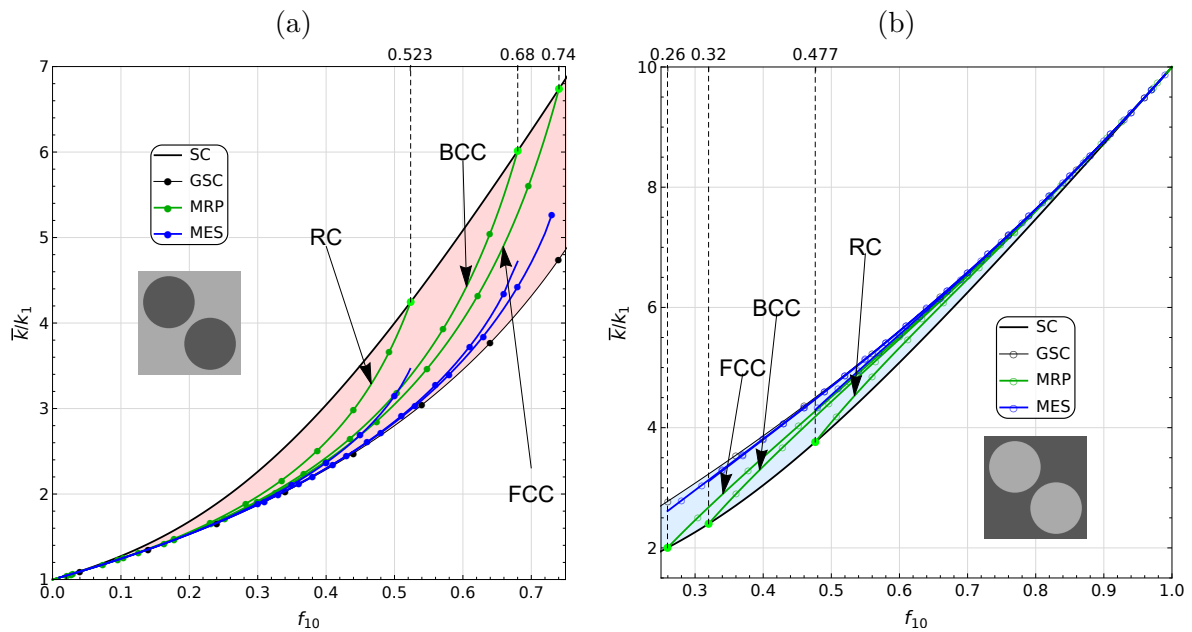
Na wykresach krzywe dla modelu MRP oznaczone RC, BCC i FCC są uzyskane dla losowego (izotropowego) układu położenia wtrąceń określonego przez następujące zależności  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  od  $f_{\text{inc}}$  według Eq.3.5, powtórzonych poniżej dla wygody czytelnika:

$$\frac{\bar{\lambda}^{\text{RC}}}{2R_{\text{inc}}} = \left(\frac{\pi}{6f_{\text{inc}}}\right)^{1/3} - 1, \quad \frac{\bar{\lambda}^{\text{BCC}}}{2R_{\text{inc}}} = \left(\frac{\sqrt{3}\pi}{8f_{\text{inc}}}\right)^{1/3} - 1, \quad \frac{\bar{\lambda}^{\text{FCC}}}{2R_{\text{inc}}} = \left(\frac{\sqrt{2}\pi}{6f_{\text{inc}}}\right)^{1/3} - 1. \quad (4.1)$$

Warunek  $\bar{\lambda} = 0$  określa maksymalny udział objętościowy frakcji (Eq.3.6) nienachodzących się



wtrąceń. Reprezentacja położenia wtrąceń rozmieszczonych jak atomy w układach krystalograficznych RC, BCC i FCC przedstawiono na Rys. 3.4.



Rysunek 4.2: Stosunek efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  do współczynnika przewodzenia ciepła fazy słabo przewodzącej ciepło  $k_1 = 1$  vs. udział objętościowy fazy dobrze przewodzącej ciepło  $f_{10}$  o  $k_{10} = 10$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna komórki jednostkowej. Układy krystalograficzne: RC – prosty, BCC – ściennie centrowany, FCC – przestrzennie centrowany. Parametr upakowania  $\lambda / (2R_{inc})$  układów krystalograficznych przyjęto jako funkcję  $\lambda(f_{inc})$  określoną w równaniach 3.5. (a) kompozyt o dobrze przewodzących ciepło wtrąceniami  $k_{inc} = 10$  i słabo przewodzącej ciepło osnowie  $k_m = 1$ , (b) kompozyt o słabo przewodzących ciepło wtrąceniami  $k_{inc} = 1$  i dobrze przewodzącej ciepło osnowie  $k_m = 10$ .

Na Rys.4.2 zaprezentowano oszacowania efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła otrzymane przy pomocy homogenizacji numerycznej oraz modelami mikromechanicznymi: SC, MRP i GSC, dwufazowego kompozytu o układzie wtrąceń RC, BCC i FCC. W podejściu MRP parametr upakowania przyjęto zgodnie z formułą 3.5 odpowiednią do układu regularnego RC, BCC i FCC komórki jednostkowej, innymi słowy w modelu MRP zależność między parametrem upakowania, a udziałem objętościowym wtrąceń jest taka sama jak dla odpowiednich układów regularnych. Wyniki homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych dla udziałów objętościowych poniżej 30% są bliskie oszacowaniom schematu GSC. Wraz ze wzrostem udziału objętościowego wtrąceń w analizie MES manifestuje się wpływ ich upakowania - na Rys.4.2.a zaobserwowano odchylenie się krzywych wyników MES od krzywej GSC, gdy udział objętościowy

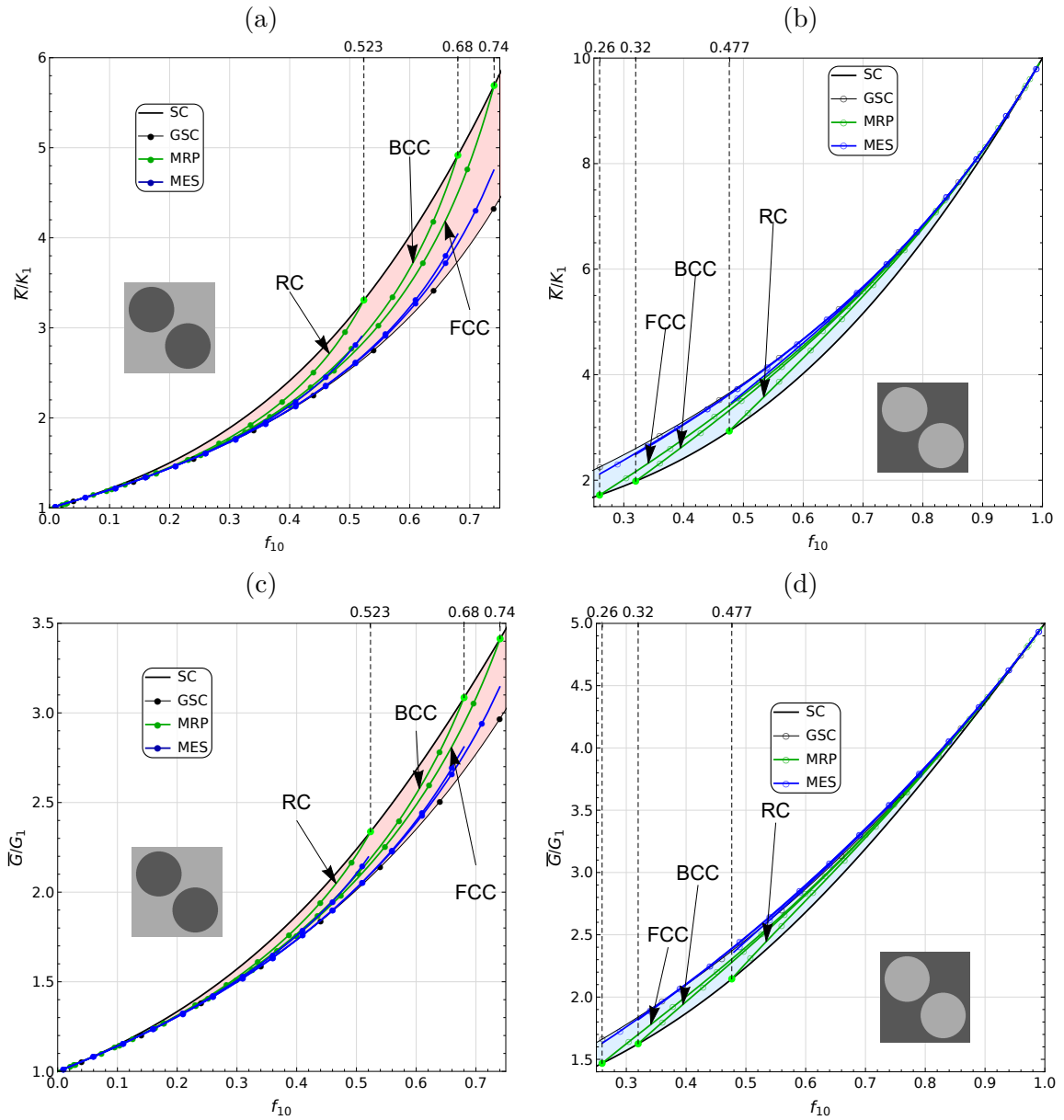
wtrąceń dąży do maksymalnej wartości (Eq.3.6). Efekt ten jest silniejszy w przypadku, gdy faza rozproszona jest fazą o wysokiej sztywności lub przewodności cieplnej. W modelu MRP odnotowano podobny do wyników MES charakter krzywej, choć przewidywane odchylenie wynikające z efektu upakowania jest większe niż w analizach MES.

Analogicznie jak w przypadku współczynnika przewodzenia ciepła wyznaczono tensor sprężystości kompozytu. Oszacowano moduły objętościowy i ścinania homogenizacją numeryczną oraz modelami mikromechanicznymi: SC, MRP i GSC, dwufazowego kompozytu o układzie wtrąceń RC, BCC i FCC. Należy przypomnieć, że w przypadku analizy MES rezultaty dotyczące modułu ścinania podlegały procedurze izotropizacji opisanej w podrozdziale 3.2. Porównanie wyników zaprezentowano na Rys.4.3. Wnioski z analizy wyników z Rys.4.3 są analogiczne jak te dla Rys.4.2. Zarówno w przypadku homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych jak i w podejściu MRP obserwujemy istotny wpływ upakowania wtrąceń na efektywną odpowiedź kompozytu. W kompozytach o regularnym położeniu wtrąceń, w których parametr upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  przyjęto jako funkcję  $\lambda(f_{inc})$  określoną w równaniach 3.5, wraz ze zmianą udziału objętościowego wtrąceń  $f_{inc}$  zmiana wartości  $\lambda$  wpływa na efektywne właściwości kompozytu w następujący sposób:

- dla niewielkiego udziału objętościowego wtrąceń, około  $f_{inc} < 30\%$ , wyniki homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych są w dobrej zgodności z wynikami uogólnionego schematu samozgodnego,
- wraz ze wzrostem udziału objętościowego fazy wtrąceń ( $f_{inc} \geq 30\%$ ) wyniki homogenizacji numerycznej odbiegają od oszacowań GSC dążąc do oszacowania schematem samozgodnym.

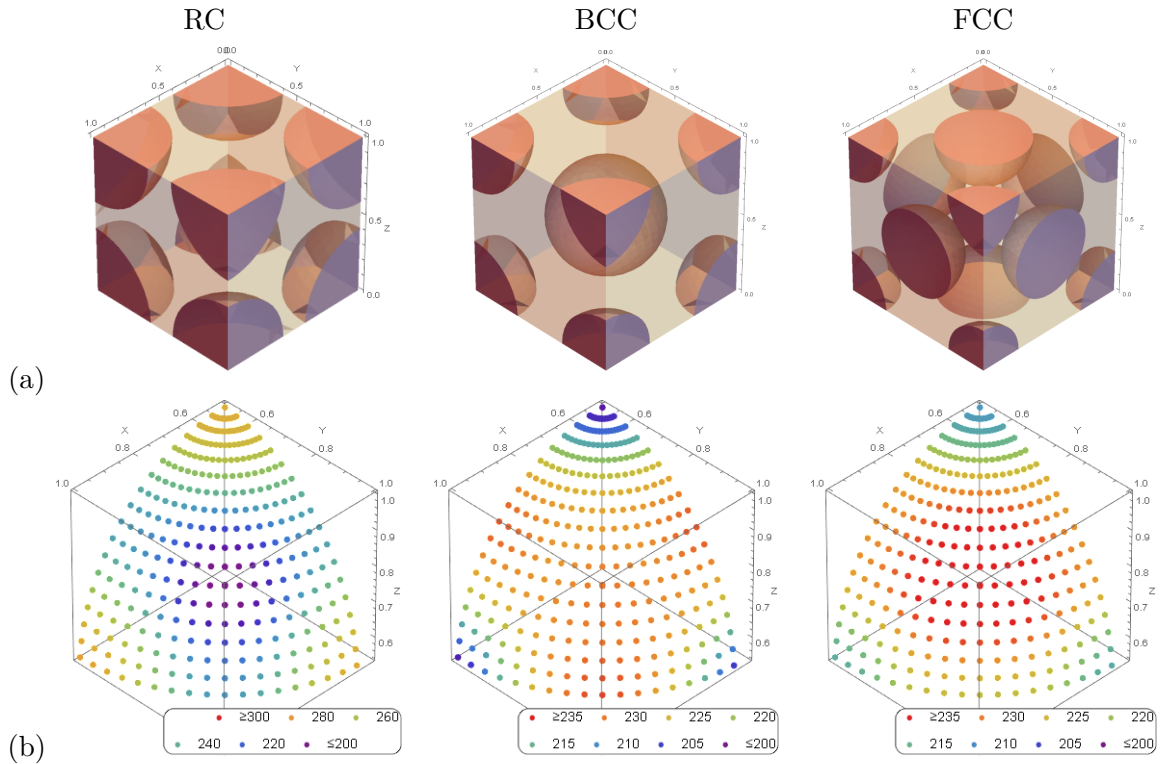
Jest to szczególnie widoczne dla wtrąceń o lepszych właściwościach (wyższa sztywność) niż faza osnowy (Rys.4.3.a i c). Podobne zachowanie zaobserwowano w modelu MRP: dla dużych wartości parametru upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$ , konsekwentnie z Eq.3.5 małe wartości  $f_{inc}$ , oszacowanie MRP jest bliskie rezultatom GSC, a dla dużego udziału objętościowego wtrąceń  $f_{inc}$  parametr upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  ma małą wartość, stąd rozwiązanie MRP jest zbliżone do oszacowania schematem SC.

Oszacowanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej za pomocą modeli mikromechanicznych oraz homogenizacji numerycznej wykonano dla dwufazowego kompozytu MMC opisanego w sekcji 2.4.2. Przyjęte parametry materiałowe zostały wypisane w tabeli 2.3. Położenie wtrąceń przyjęto jak w układach krystalograficznych RC, BCC i FCC (Rys.4.4.a). Komórka jednostkowa o układzie wtrąceń RC lub FCC wykazuje ekstremalne wartości naprężenia dla testu rozciągania w kierunku zgodnym z którąś z krawędzi komórki (osie układu kartezjańskiego np. (0, 0, 1) oś Z) oraz w kierunku przekątnej komórki jednostkowej np. (1, 1, 1) w układzie (X,Y,Z) (Rys.4.4.b). W komórce jednostkowej o układzie wtrąceń BCC minimalną wartość naprężenia uzyskano dla testu rozciągania w kierunku zgodnym z którąś z osi układu kartezjańskiego (Rys.4.4.b.2). Maksymalne naprężenie uzyskano w kierunku prostopadłym do jednej z osi układu kartezjańskiego



Rysunek 4.3: (a) i (b) Stosunek efektywnego modułu objętościowego  $\bar{K}$ , (c) i (d) modułu ścinania  $\bar{G}$ , do modułu objętościowego fazy miękkiej  $K_1 = 1$  (modułu ścinania  $G_1 = 1$ ) vs. udział objętościowy fazy twardej  $f_{10}$  o  $K_{10} = 10$  i  $G_5 = 5$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna komórki jednostkowej. Układy krystalograficzne: RC – prosty, BCC – ściennie centrowany, FCC – przestrzennie centrowany. Parametr upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  układów krystalograficznych przyjęto jako funkcję  $\lambda(f_{inc})$  określoną w równaniach 3.5. (a) i (c) kompozyt o twardych wtrąceniach  $K_{inc} = 10$ ,  $G_{inc} = 5$  i miękkiej osnowie  $K_m = 1$ ,  $G_m = 1$ , (b) i (d) kompozyt o miękkich wtrąceniach  $K_{inc} = 1$ ,  $G_{inc} = 1$  i twardej osnowie  $K_m = 10$ ,  $G_m = 5$ .

(np. X) oraz pod kątem  $45^\circ$  do pozostałych osi (np.  $(0, 1, 1)$ ), niemniej wartość naprężenia w tym kierunku jest tylko o 4 MPa większa od naprężenia w kierunku po przekątnej, dlatego na wykresie Rys.4.6 zdecydowano się pokazać wyniki  $\sigma_{Mises}$  układu BCC w kierunku  $(1, 1, 1)$  jak dla pozostałych układów RC i FCC. Można zauważyć, że są to kierunki ekstremalnych wartości kierunkowego modułu Younga wyznaczonego analitycznie w publikacji [130] dla materiałów o symetrii kubicznej.



Rysunek 4.4: Widok w kierunku  $(1, 1, 1)$ . (a) Struktury krystalograficzne RC, BCC oraz FCC z  $f_{inc} = 30\%$ . (b) Naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa [MPa] dla  $\varepsilon = 3\%$  kompozytu MMC w teście rozciągania w zadanym kierunku  $\varepsilon(\mathbf{v})$  (Eq.4.2). Wykres punktowy przedstawiono na fragmencie  $1/8$  struktury ze względu na symetrię wyników. Położenie punktów odpowiada końcowi wersora  $\mathbf{v}$  o punkcie początkowym  $(0,0,0)$ .

Rozciąganie w kierunku wersora  $\mathbf{v}$  zrealizowano poprzez tensor małych odkształceń  $\varepsilon$ :

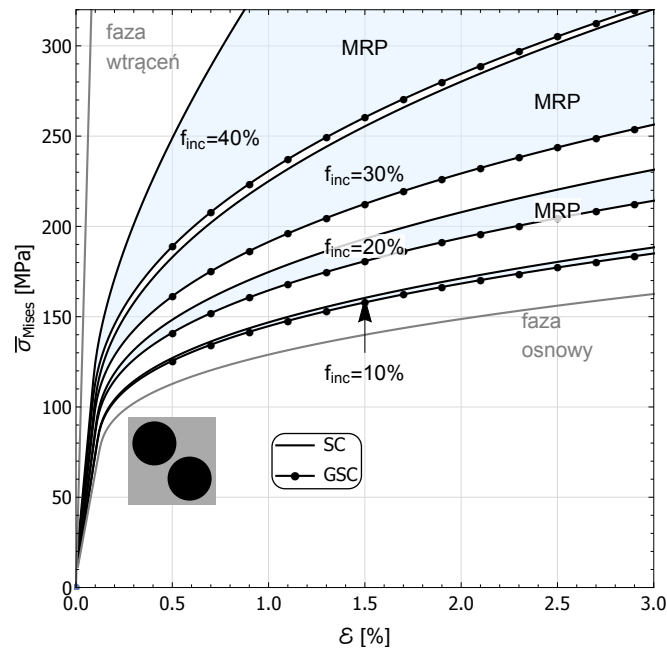
$$\varepsilon = \varepsilon \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \quad . \quad (4.2)$$

W symulacjach MES zadano periodyczne warunki brzegowe w przemieszczeniach (Eq.3.3) za pomocą tensora  $\varepsilon$  jak wyżej. Przykładowo dla wersorów  $(0, 0, 1)$ , kierunek osi Z, oraz  $(1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3})$ , kierunek zgodny z przekątną komórki jednostkowej, tensor odkształcenia ma reprezen-

tację w układzie kartezjańskim:

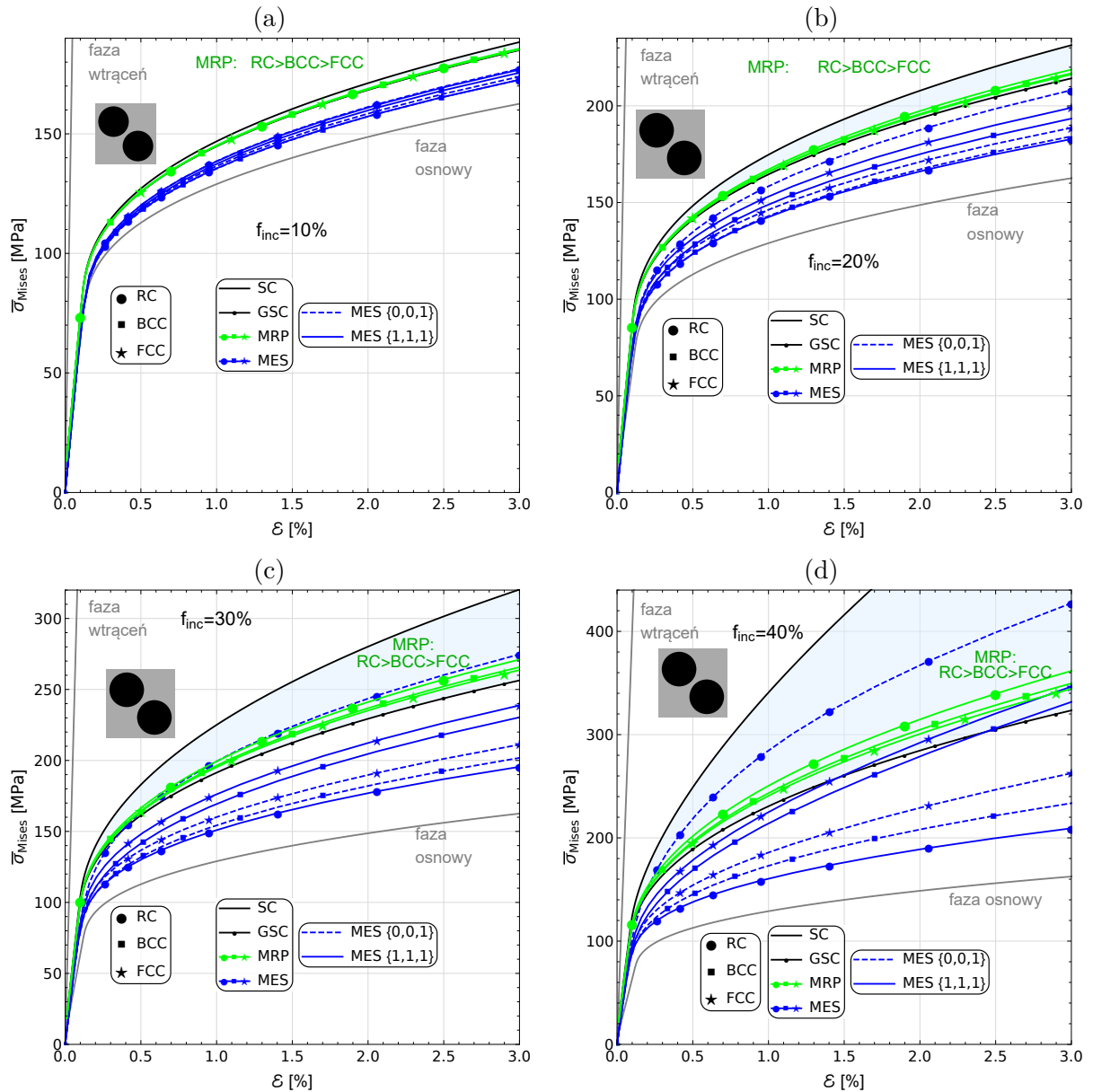
$$\boldsymbol{\varepsilon}_{(0,0,1)} = \boldsymbol{\varepsilon} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})} = \boldsymbol{\varepsilon} \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Na Rys.4.5 i Rys.4.6 zaprezentowano oszacowanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej kompozytu MMC w teście rozciągania w zadanym kierunku  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})$  (Eq.4.2). Efektywną odpowiedź kompozytu przedstawiono jako zmianę naprężenia ekwiwalentnego Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  w funkcji odkształcenia  $\varepsilon$  w kierunku rozciągania. Pokazane na wykresach 4.5 i 4.6 wyniki modeli mikromechanicznych otrzymano stosując linearyzację styczną. Oszacowania modeli analitycznych otrzymane przy zastosowaniu linearyzacji sieciowej znacząco odbiegały od wyników MES. Na Rys.4.5 pokazano wpływ udziału objętościowego wtrąceń. Przyjęte udziały objętościowe wtrąceń to  $f_{inc} = (10\%, 20\%, 30\%, 40\%)$ . Wraz ze wzrostem udziału objętościowego zbrojenia w kompozycie wzrastają różnice w przewidywaniach schematów SC i GSC. Różnica między naprężeniem ekwiwalentnym Hubera-Misesa dla  $f_{inc} = 10\%$  oszacowanym schematem SC a jego uogólnieniem wynosi około 5 MPa dla  $\varepsilon = 3\%$ , natomiast dla  $f_{inc} = 30\%$  jest to już różnica około 60 MPa.



Rysunek 4.5: Oszacowanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej kompozytu MMC o  $f_{inc} = (10\%, 20\%, 30\%, 40\%)$  w teście rozciągania: naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  vs. odkształcenie  $\varepsilon$  w kierunku rozciągania. Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny. W modelach mikromechanicznych zastosowano linearyzację styczną.

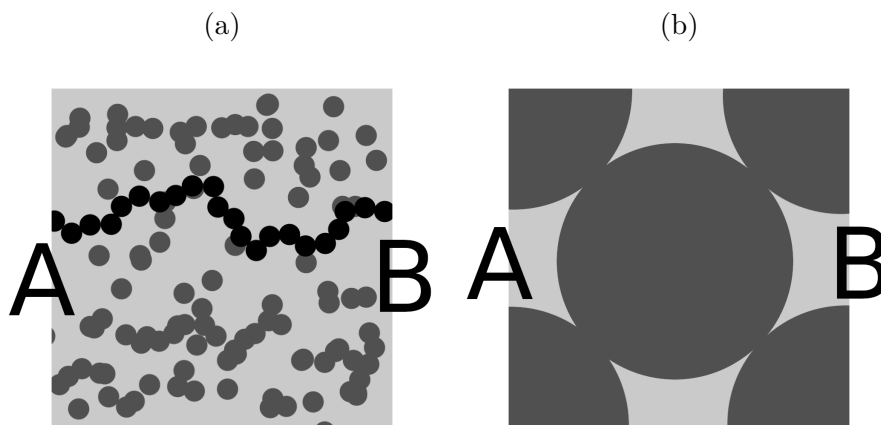
Odpowiedź sprężysto-plastyczna  $\sigma_{Mises}(\varepsilon)$  otrzymana przez analizę MES komórki jednostkowej układów krystalograficznych RC, BCC i FCC zależy od kierunku rozciągania (Rys.4.4). Jak pokazano na Rys.4.4 w układzie RC obserwuje się większą różnicę ekstremalnych wartości ekwiwalentnego naprężenia Hubera-Misesa niż w układach BCC i FCC. Przykładowo różnica  $\sigma_{Mises}(\varepsilon = 3\%)$  dla układów BCC i FCC o  $f_{inc} = 30\%$  wynosi około 30 MPa (Rys.4.6.c), natomiast dla komórki jednostkowej o periodycznym układzie wtrąceń RC aż około 80 MPa. Powodem obserwowanych różnic jest rozłożenie fazy wtrąceń w komórce jednostkowej: w układzie prostym jest to jedna sfera, w układzie przestrzennie centrowanych są to dwie sfery, w układzie ściennie centrowanym są to cztery sfery. Należy zaznaczyć, że w przypadku właściwości sprężysto-plastycznych nie stosowano procedury izotropizacji wyników MES (podrozdział 3.2) stosowanej dla właściwości sprężystych. Wraz ze wzrostem udziału objętościowego wtrąceń: od 10% (Rys.4.6.a) do 40% (Rys.4.6.d), wzrasta różnica uzyskanej numerycznie odpowiedzi  $\sigma_{Mises}$  kompozytu MMC w zależności od kierunku  $\mathbf{v}$ : (0,0,1) czy (1,1,1). Na podstawie analizy wyników zaprezentowanych na rysunku 4.4 można stwierdzić, że krzywe naprężenie-odkształcenie otrzymane dla pozostałych kierunków znajdują się pomiędzy pokazanymi dwoma krzywymi. Dla udziałów objętościowych ceramiki  $f_{inc} = 10\%$  lub  $20\%$  wyniki homogenizacji numerycznej znajdują się poniżej oszacowań podejściem mikromechanicznym (Rys.4.6.a i b). Dla  $f_{inc} = 30\%$  oszacowanie  $\sigma_{Mises}(\varepsilon)$  otrzymane modelem MRP, dla izotropowego rozkładu wtrąceń i o identycznym parametrze upakowania jak odpowiednia komórka jednostkowa, jest zgodne z odpowiedzią MES dla układu RC na rozciąganie w kierunku jednej z osi układu kartezjańskiego, tzn. w kierunku maksymalnego naprężenia ekwiwalentnego Hubera-Misesa dla komórki jednostkowej z układem RC. W układach FCC i BCC naprężenie  $\sigma_{Mises}$  dla  $\varepsilon = 3\%$  uzyskane w symulacji numerycznej jest większe od odpowiedzi oszacowanej uogólnionym schematem samozgodnym dla  $f_{inc} = 40\%$  w kierunku  $\mathbf{v} = (1, 1, 1)$  (Rys.4.6.d). Na Rys.4.6 w większości przypadków odpowiedź sprężysto-plastyczna kompozytu MMC w zakresie płynięcia plastycznego otrzymana schematem GSC jest sztywniejsza niż rezultaty homogenizacji numerycznej, odwrotnie jak dla właściwości sprężystych (Rys.4.3.a i c), w których dla dowolnego udziału objętościowego fazy wtrąceń moduły sprężyste oszacowane uogólnionym schematem samozgodnym są niższe niż rezultaty homogenizacji numerycznej. Generalnie wyniki homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych znajdują się poniżej rezultatów modeli mikromechanicznych z wyjątkami:  $\sigma_{Mises}(\varepsilon)$  dla układu RC dla  $f_{inc} = 30\%$  lub  $40\%$  w kierunku (0, 0, 1) oraz dla układu BCC i FCC w kierunku (1, 1, 1) dla  $f_{inc} = 40\%$ .



Rysunek 4.6: Naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  vs. odkształcenie  $\varepsilon$  w kierunku rozciągania (Eq.4.3). W podejściu mikromechanicznym zastosowano linearyzację styczną. Kompozyt MMC o układzie wtrąceń RC, BCC lub FCC i różnym udziale objętościowym wtrąceń  $f_{inc}$ : (a) 10%, (b) 20%, (c) 30% oraz (d) 40%. Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna komórki jednostkowej za pomocą metody elementów skończonych. W przewidywaniach MRP oraz homogenizacji numerycznej stosunek parametru upakowania  $\lambda / (2R_{inc})$  przyjęto jako funkcję  $\lambda(f_{inc})$  odpowiednią dla układów krystalograficznych: RC, BCC i FCC określoną kolejno w równaniach (3.5)<sub>1</sub>, (3.5)<sub>2</sub>, (3.5)<sub>3</sub>. Symulacje numeryczne MES rozciągania wykonano w dwóch kierunkach: (0, 0, 1) oraz (1, 1, 1) (Eq.4.3).

## 4.2 Limit perkolacji

Zagadnienie perkolacji w matematyce i fizyce odnosi się do uproszczonych modeli losowych systemów lub sieci (np. grafik) i charakteru łączności w nich. Limit perkolacji (próg perkolacji) dla parametru tworzącego sieć (np. udział objętościowy wtrąceń w kompozycie) jest krytyczną wartością prawdopodobieństwa, że w systemie występuje łączność pomiędzy granicami - perkolacja [131]. Innymi słowy próg perkolacji jest matematyczną koncepcją, która polega na tworzeniu połączeń dalekiego zasięgu w systemach losowych. Na przykładzie kompozytów dla wartości udziału objętościowego wtrąceń (parametru tworzącego losową sieć kompozytu) poniżej progu perkolacji nie ma komponentu danej fazy wtrąceń łączącego granice kompozytu. Na Rys.4.7 schematycznie zaprezentowano perkolację w kompozycie dwufazowym o (a) losowym lub (b) regularnym położeniu wtrąceń. Osiągnięcie progu perkolacji ma swoje odzwierciedlenie w otrzymywanych granicznych wartościach stałych materiałowych (podrozdział 2.2.4). Istnienie takiego progu obserwuje się również w badaniach doświadczalnych. Jak opisano w pracach [132, 133], do wyznaczenia progu perkolacji modułu sprężystości materiałów kompozytowych wykonuje się testy obciążenia blach z losowo rozmieszczonymi okrągłymi wycięciami (kompozyt dwufazowy w płaskim stanie naprężenia).



Rysunek 4.7: Prezentacja perkolacji. (a) Losowe położenie sferycznych wtrąceń, które mogą na siebie nachodzić, tworząc perkolację zaznaczoną kolorem czarnym łączącą bok A i B przekroju. (b) Przekrój komórki jednostkowej BCC, w której gdy  $f_{inc} \geq \sqrt{3}\pi/8 \approx 0.68$  następuje połączenie wtrąceń powodując perkolację.

W celu ustalenia limitów perkolacji w klasycznych modelach mikromechanicznych założono kompozyt dwufazowy z perfekcyjnym połączeniem faz ( $\alpha = 0$ ) o fazie osnowy  $(K_m, G_m) = (1, 1)$  i  $k_m = 1$  z pustkami  $(K_{inc}, G_{inc}) \rightarrow (0, 0)$  i  $k_{inc} = 0$ , bądź zbrojonej super wtrąceniami  $(K_{inc}, G_{inc}) \rightarrow (\infty, \infty)$  i  $k_{inc} \rightarrow \infty$ . Przewidywany efektywny współczynnik przewodzenia ciepła dla klasycznych modeli mikromechanicznych zaprezentowano na Rys.4.8, natomiast wyniki



przewidywać efektywnego modułu ścinania na Rys.4.9 (dla efektywnego modułu objętościowego otrzymano jakościowo analogiczne rezultaty). Modele mikromechaniczne GSC, MT, oraz oszacowania graniczne: HS, Voigta i Reussa, w obu przypadkach: pustek  $(k_{\text{inc}}, K_{\text{inc}}, G_{\text{inc}}) \rightarrow (0, 0, 0)$ , lub super wtrąceń  $(k_{\text{inc}}, K_{\text{inc}}, G_{\text{inc}}) \rightarrow (\infty, \infty, \infty)$ , przewidują efektywne parametry kompozytu odpowiednio  $(\bar{k}, \bar{K}, \bar{G}) \rightarrow 0$ , lub  $(\bar{k}, \bar{K}, \bar{G}) \rightarrow \infty$ , gdy  $f_{\text{inc}} \rightarrow 1$ . W kompozycie z pustkami  $(k_{\text{inc}}, K_{\text{inc}}, G_{\text{inc}}) \rightarrow (0, 0, 0)$  oszacowania graniczne: Reussa oraz dolne HS są równe  $(\bar{k}, \bar{K}, \bar{G}) = 0$  dla dowolnego  $f_{\text{inc}}$ , dlatego na wykresach Rys.4.8 i Rys.4.9 przerywanymi liniami zaprezentowano wyniki dla oszacowania Voigta i górnego HS. W kompozycie z super wtrąceniami  $(k_{\text{inc}}, K_{\text{inc}}, G_{\text{inc}}) \rightarrow (\infty, \infty, \infty)$  sytuacja jest odwrotna: oszacowania graniczne Reussa oraz dolne HS zaprezentowano na wykresach Rys.4.8 i Rys.4.9 przerywanymi liniami, natomiast oszacowania Voigta i górnego HS kompozytu wynoszą  $(\bar{k}, \bar{K}, \bar{G}) = \infty$  niezależnie od  $f_{\text{inc}}$ .

W zagadnieniu przewodzenia ciepła dla kompozytu z pustkami  $k_{\text{inc}} \rightarrow 0$  i  $\alpha = 0$  rozwiązanie  $\bar{k}^{\text{SC}}$  (Eq.2.21) ma postać:

$$\lim_{k_{\text{inc}} \rightarrow 0} \bar{k}^{\text{SC}} = (S_m + |S_m|) / 4, \quad \text{gdzie} \quad S_m = k_m(2 - 3f_{\text{inc}}). \quad (4.4)$$

Z założeń:  $\bar{k}^{\text{SC}} > 0$ ,  $k_m > 0$  i  $0 \leq f_{\text{inc}} \leq 1$  wynika, że:

$$\lim_{k_{\text{inc}} \rightarrow 0} \bar{k}^{\text{SC}} > 0 \Rightarrow S_m > 0 \Rightarrow k_m(2 - 3f_{\text{inc}}) > 0 \Rightarrow 2/3 > f_{\text{inc}} > 0. \quad (4.5)$$

Powyższa zależność jest także prawdziwa, jeżeli w kompozycie występuje opór cieplny na granicy faz tj.  $\alpha > 0$ .

Dla kompozytu z super wtrąceniami  $k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$  i  $\alpha = 0$  granica prawej strony równania  $\bar{k}^{\text{SC}}$  (Eq.2.19.3) wynosi:

$$\lim_{k_{\text{inc}} \rightarrow \infty} \bar{k}^{\text{SC}} \Rightarrow \bar{k}^{\text{SC}} = \frac{k_m}{1 - 3f_{\text{inc}}}. \quad (4.6)$$

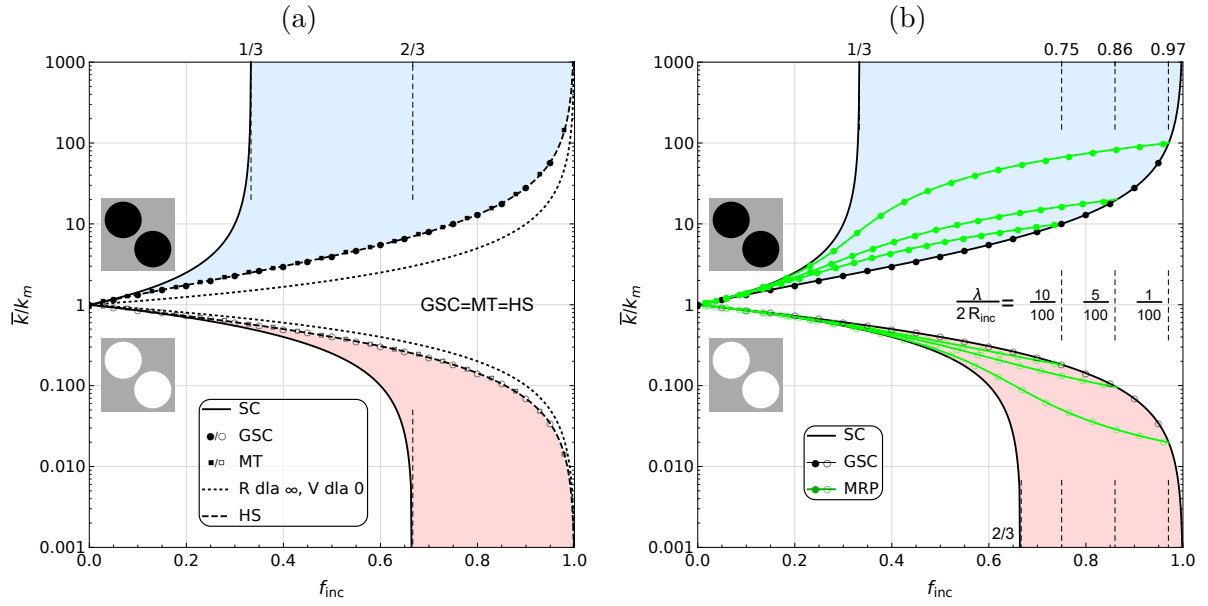
Z założeń:  $\bar{k}^{\text{SC}} > 0$ ,  $k_m > 0$  i  $0 \leq f_{\text{inc}} \leq 1$  wynika, że:

$$\lim_{k_{\text{inc}} \rightarrow \infty} \bar{k}^{\text{SC}} > 0 \Rightarrow \frac{k_m}{1 - 3f_{\text{inc}}} > 0 \Rightarrow 1/3 > f_{\text{inc}} > 0. \quad (4.7)$$

Jeżeli w kompozycie występuje opór cieplny na granicy faz  $\alpha > 0$ , to rozwiązanie  $\bar{k}^{\text{SC}}$  istnieje dla przedziału  $0 < f_{\text{inc}} < 1$  dla  $k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$  i ma postać:

$$\bar{k}^{\text{SC}} = \frac{1}{4} \left( S_m - s_{\text{inc}} s_\alpha + \sqrt{(S_m - s_{\text{inc}} s_\alpha)^2 + 8k_m s_\alpha} \right), \quad (4.8)$$

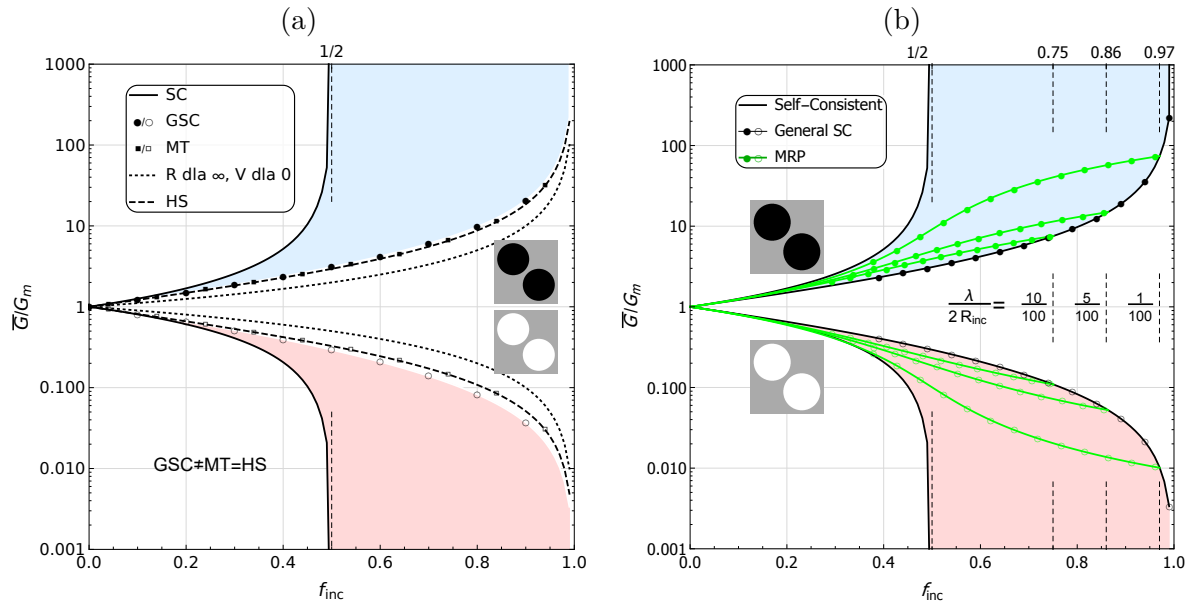
gdzie  $s_{\text{inc}} = 1 - 3f_{\text{inc}}$ ,  $S_m = k_m(2 - 3f_{\text{inc}})$  i  $s_\alpha = \frac{R}{\alpha}$ . Dla kompozytu z pustkami  $k_{\text{inc}} \rightarrow 0$  limit perkolacji  $\bar{k} \rightarrow 0$  efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła wyznaczonego schematem SC, niezależnie od  $\alpha \geq 0$ , wynosi  $f_{\text{inc}} = 2/3$  (Eq.4.5). Natomiast dla kompozytu z super wtrąceniami  $k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$  i  $\alpha = 0$  limit perkolacji dla schematu SC  $\bar{k} \rightarrow \infty$  wynosi  $f_{\text{inc}} = 1/3$  (Eq.4.7). Dla  $k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$  i  $\alpha > 0$  oszacowanie  $\bar{k}^{\text{SC}}$  podano w Eq.4.8. Asymptoty 1/3 i 2/3 oznaczono linią przerywaną na Rys.4.8.



Rysunek 4.8: Stosunek efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  do współczynnika przewodzenia ciepła osnowy  $k_m = 1$  vs. udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc}$  o  $k_{inc} \rightarrow \infty$  lub  $k_{inc} \rightarrow 0$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu, MT – model Mori-Tanaka, V i R – oszacowania graniczne Voigta i Reussa, HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-Shtrikmana. (b) w przewidywaniach MRP stosunek parametru upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  przyjęto jako stały i równy: 1/100, 5/100 lub 10/100. Oś Y - skala logarytmiczna.

Na Rys.4.9 przewidywania  $\bar{G}$  zostały zaprezentowane dla dwóch ekstremalnych przypadków: ze sztywnymi wtręciami, bądź pustkami (odpowiednio nieskończone lub zerowe wartości  $G_{inc}$  i  $K_{inc}$ ), rozprzestrzenionych w osnowie  $G_m = 1$  i  $K_m = 1$ . Schemat samozgodny dla wymienionych ekstremalnych przypadków wykaże odpowiednio 0 i nieskończoność dla udziału objętościowego wtrąceń powyżej 1/2 [56]. Jeżeli osnowa jest nieściśliwa  $\nu_m=1/2$  wtedy granica przesuwa się do wartości 2/5 dla schematu samozgodnego.

Limit perkolacji udziału objętościowego wtrąceń jest dziedziczony przez model MRP, w którym odpowiednia granica perkolacji jest wyższą z wartości: dla efektywnego tensora sztywności  $f_{inc}^{perk} = 1/2$  lub analogicznie dla efektywnego tensora przewodności cieplnej  $f_{inc}^{perk} = 2/3$  dla porów i  $f_{inc}^{perk} = 1/3$  dla super przewodników, oraz objętości wtrąceń odpowiadającej  $\bar{\lambda} = 0$ . Na wykresach Rys.4.8.b i Rys.4.9.b kolorem zielonym przedstawiono wyniki modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu, w którym przyjęto stosunek parametru upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  przyjęto jako stały: 1/100, 5/100 lub 10/100, stąd niezależnie od udziału objętościowego fazy wtrąceń  $\bar{\lambda} \neq 0$ .

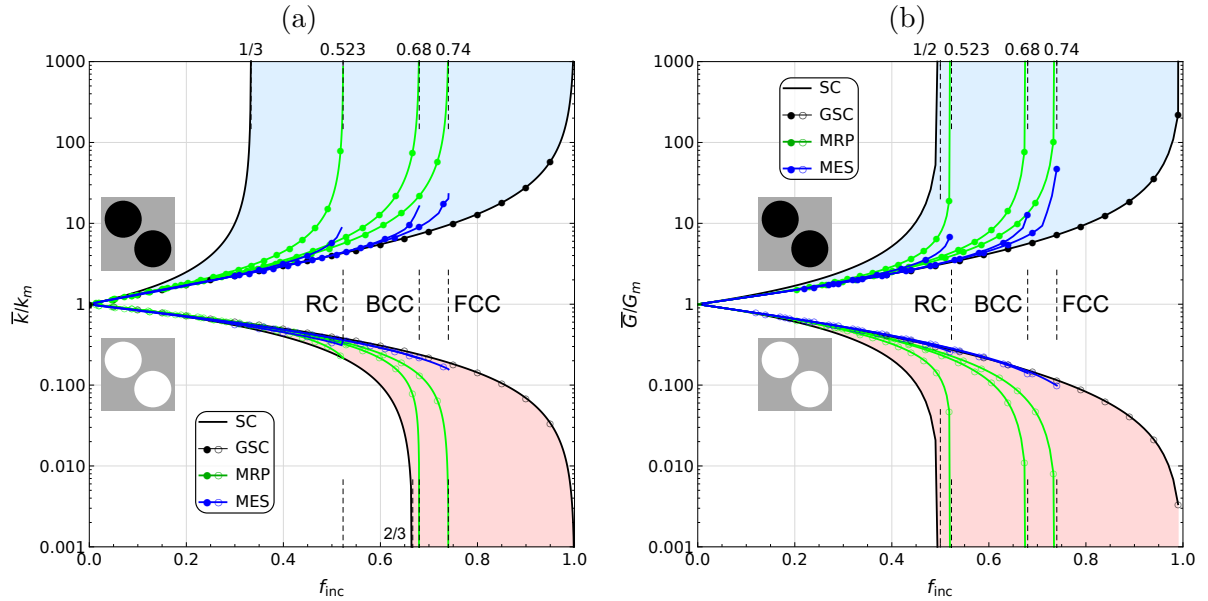


Rysunek 4.9: Stosunek efektywnego modułu ścinania kompozytu  $\bar{G}$  do modułu ścinania osnowy  $G_m = 1$  vs. udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc}$  o  $K_{inc}$  i  $G_{inc} \rightarrow \infty$  lub  $\rightarrow 0$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu, MT – model Mori-Tanaka, V i R – oszacowania graniczne Voigta i Reussa, HS – oszacowanie graniczne górne i dolne Hashina-Shtrikmana. (b) w przewidywaniach MRP stosunek parametru upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  przyjęto jako stały: 1/100, 5/100 lub 10/100. Oś Y - skala logarytmiczna.

Na wykresach Rys.4.10 a i b w przewidywaniach MRP parametr upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  przyjęto jako funkcję  $\lambda(f_{inc})$  odpowiednią dla układów krystalograficznych: RC, BCC i FCC określoną kolejno w równaniach (3.5)<sub>1</sub>, (3.5)<sub>2</sub>, (3.5)<sub>3</sub>. Jeżeli udział objętościowy wtrąceń dąży do maksymalnych wartości  $f_{inc} \rightarrow f_{inc}^{Max}$ , dla układów  $f_{inc}^{Max}(RC, BCC, FCC) = (0.52, 0.68, 0.72)$  (Eq.3.6), to  $\bar{\lambda} \rightarrow 0$  i oszacowania MRP dążą do  $\infty$  lub 0 wykazując limit perkolacji. Wyjątkiem jest przypadek efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła oszacowany metodą MRP dla układu upakowania RC kompozytu z pustkami, w którym  $f_{inc}^{Max}(RC) = 0.52 < f_{inc}^{perk}(SC) = 2/3$  dlatego  $\bar{k}_{MRP}(f_{inc} = 0.52) = \bar{k}_{SC} > 0$ .

Na Rys.4.10 kolorem niebieskim oznaczono wyniki homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych. Analogicznie do rezultatów z poprzedniego podrozdziału wyniki homogenizacji numerycznej komórek jednostkowych dla udziałów objętościowych poniżej 30% są bliskie oszacowaniom schematu GSC. Wpływ upakowania wtrąceń obserwuje się wraz ze wzrostem  $f_{inc}$  - na Rys.4.10 zaobserwowano odchylenie się krzywych wyników MES od krzywej GSC, gdy udział objętościowy wtrąceń dąży do maksymalnej wartości (Eq.3.6). Jest to szczególnie widoczne w efektywnym module ścinania (Rys.4.10.b) dla układu sztywnych wtrąceń FCC, który wykazuje dynamiczny wzrost wartości dla  $f_{inc} \rightarrow f_{inc}^{max}$ . Można zauważyć, że odpowiednie wyniki otrzy-

mane modelem MRP są jakościowo podobne do prezentowanych rezultatów MES.



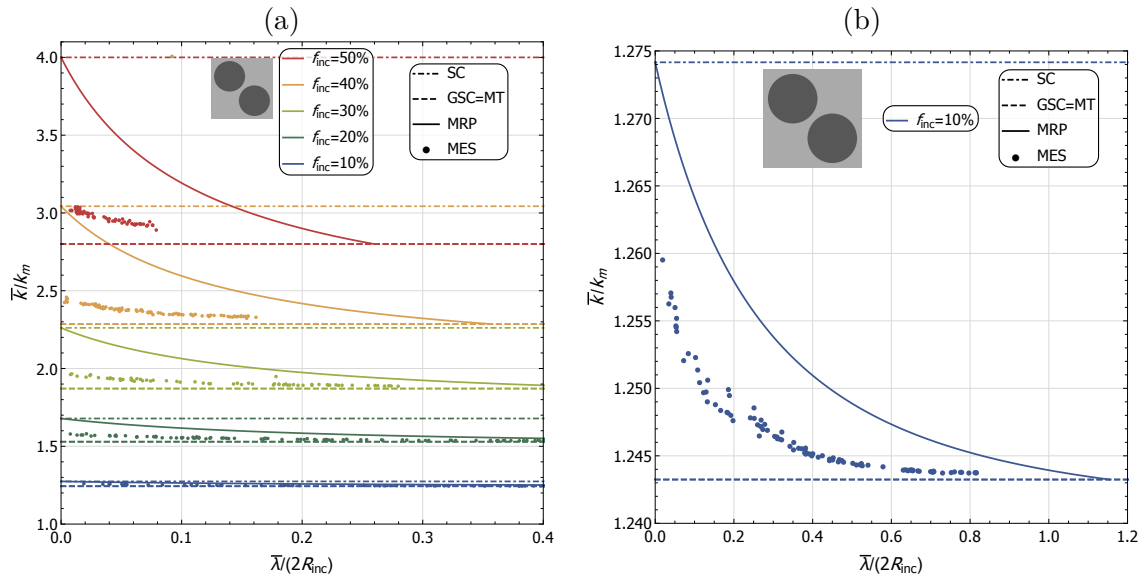
Rysunek 4.10: (a) Stosunek efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  do współczynnika przewodzenia ciepła osnowy  $k_m = 1$  vs. udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc}$  o  $k_{inc} \rightarrow \infty$  lub  $k_{inc} \rightarrow 0$ . (b) Stosunek efektywnego modułu ścinania kompozytu  $\bar{G}$  do modułu ścinania osnowy  $G_m = 1$  vs. udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc}$  o  $K_{inc}$  i  $G_{inc} \rightarrow \infty$  lub 0. Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna komórki jednostkowej. Układy krystalograficzne: RC – prosty, BCC – ściennie centrowany, FCC – przestrzennie centrowany. Parametr upakowania  $\lambda/(2R_{inc})$  układów krystalograficznych przyjęto jako funkcję  $\lambda(f_{inc})$  określoną w równaniach 3.5. Oś Y - skala logarytmiczna.

### 4.3 Analiza wpływu upakowania wtrąceń

W podrozdziale 4.1 przeanalizowano wpływ upakowania wtrąceń przy wykorzystaniu wyników dla komórek jednostkowych układów regularnych RC, BCC i FCC (np. Rys.4.2 lub Rys.4.3). W niniejszym rozdziale zaprezentowano wyniki homogenizacji numerycznej statystycznych elementów objętości z 50 sferycznymi wtrąceniami o losowym położeniu i przy założeniu okresowych warunków brzegowych. Należy przypomnieć, że oszacowania schematów SC, GSC i MT nie zależą od parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ , dlatego na Rys.:4.11,4.12,4.13 oraz 4.15, prezentujących wyniki dla ustalonego udziału objętościowego wtrąceń, są poziomymi liniami.

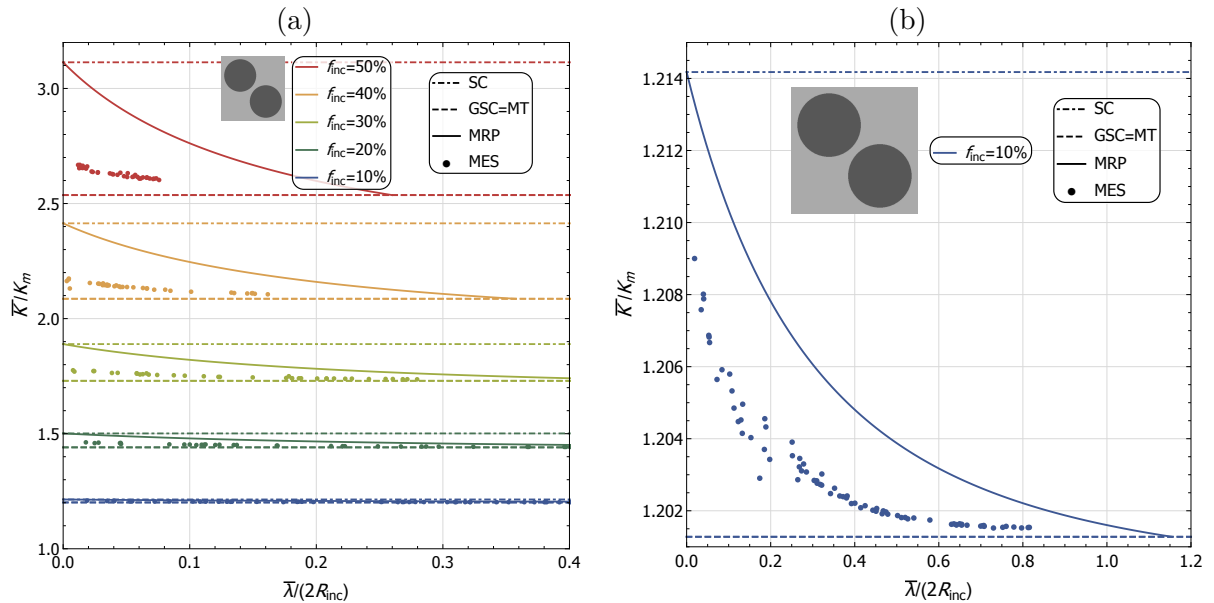
**Przewodność cieplna.** Na Rys.4.11 zaprezentowano zmianę oszacowania efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  w funkcji parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$ . Współczynnik przewodzenia ciepła wtrąceń założono  $k_{\text{inc}} = 10$ , osnowy  $k_m = 1$ . Dla zbadanych udziałów objętościowych  $f_{\text{inc}}$  od 10% do 50% wyniki MES znajdują się nad oszacowaniem GSC i poniżej MRP.

Gdy parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  maleje, zaobserwowano w modelu MRP i homogenizacji numerycznej SVE polepszenie się właściwości przewodzenia ciepła kompozytu (Rys.4.11). Choć w przypadku wyników MES istotny wpływ parametru upakowania na wartość  $\bar{k}$  jest obserwowany dla wyższych wartości udziałów objętościowych wtrąceń, to w takim przypadku dla modelu MRP mamy również do czynienia z dużym przeszacowaniem wyników uzyskanych za pomocą MES. Pod tym względem lepsze przewidywania MRP uzyskiwane są dla niewielkich udziałów objętościowych zbrojenia kompozytu. Wpływ parametru upakowania na efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu z udziałem objętościowym fazy wtrąceń  $f_{\text{inc}} = 10\%$  pokazano na Rys.4.11.b. Krzywa wyników MRP  $\bar{k}/k_m \left( \bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) \right)$  może z powodzeniem być aproksymowana funkcją  $f(x) = (x + a)^{-b} + c$ , w której szukane są trzy dodatnie stałe: a, b i c. Podobny charakter krzywej zaobserwowano dla rezultatów homogenizacji numerycznej. Dla  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) = 0$  oszacowanie modelem MRP  $\bar{k}_{\text{MRP}} = \bar{k}_{\text{SC}}$ , zaś efektywny współczynnik przewodzenia ciepła otrzymany z symulacji numerycznych MES komórek SVE z  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) \approx 0$  jest mniejszy niż dla schematu samozgodnego  $\bar{k}_{\text{MES}} < \bar{k}_{\text{SC}}$ . Natomiast jeżeli  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}}) = \bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})_{\text{MAX}} \approx 1.16$  dla  $f_{\text{inc}} = 10\%$  to oszacowanie MRP  $\bar{k}_{\text{MRP}} = \bar{k}_{\text{GSC}}$  i podobną wartość wykazują rezultaty homogenizacji MES.



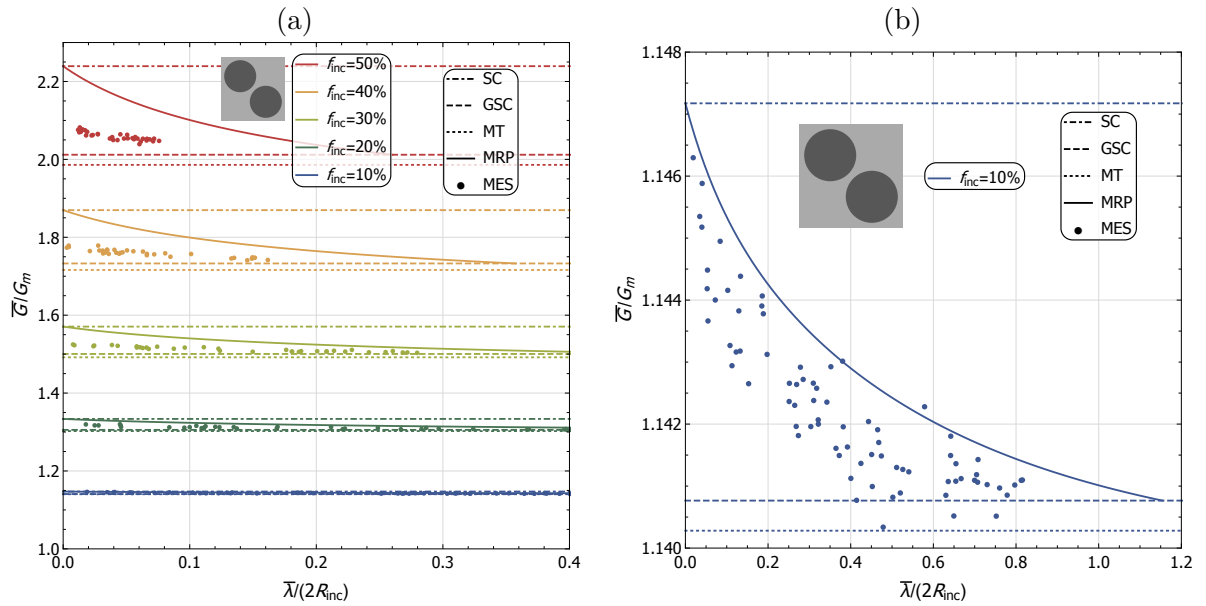
Rysunek 4.11: Efektywny współczynnik przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  vs. parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$ . Współczynnik przewodzenia ciepła: osnowy  $k_m = 1$ , wtrąceń  $k_{\text{inc}} = 10$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna SVE. (a) udział objętościowy wtrąceń  $f_{\text{inc}}$  zgodnie z legendą, (b)  $f_{\text{inc}} = 10\%$ .

**Właściwości sprężyste.** Analogicznie jak dla efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła wyniki dotyczące makroskopowego modułu objętościowego  $\bar{K}$  przedstawiono na Rys.4.12. Na Rys.4.12 dla  $f_{inc} = 10\%$  jasno widać charakter zmiany  $\bar{K}_{SVE}$  w funkcji  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ , dodatkowo otrzymany homogenizacją numeryczną MES  $\bar{K}_{SVE}$  charakteryzuje się małym rozrzutem wyników.



Rysunek 4.12: Stosunek efektywnego modułu objętościowego  $\bar{K}$  do modułu objętościowego osnowy  $K_m$  vs. parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna SVE. Parametry materiałowe wtrąceń  $(K_{inc}, G_{inc}) = (10, 5)$ . (a) udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc}$  zgodnie z legendą, (b)  $f_{inc} = 10\%$ .

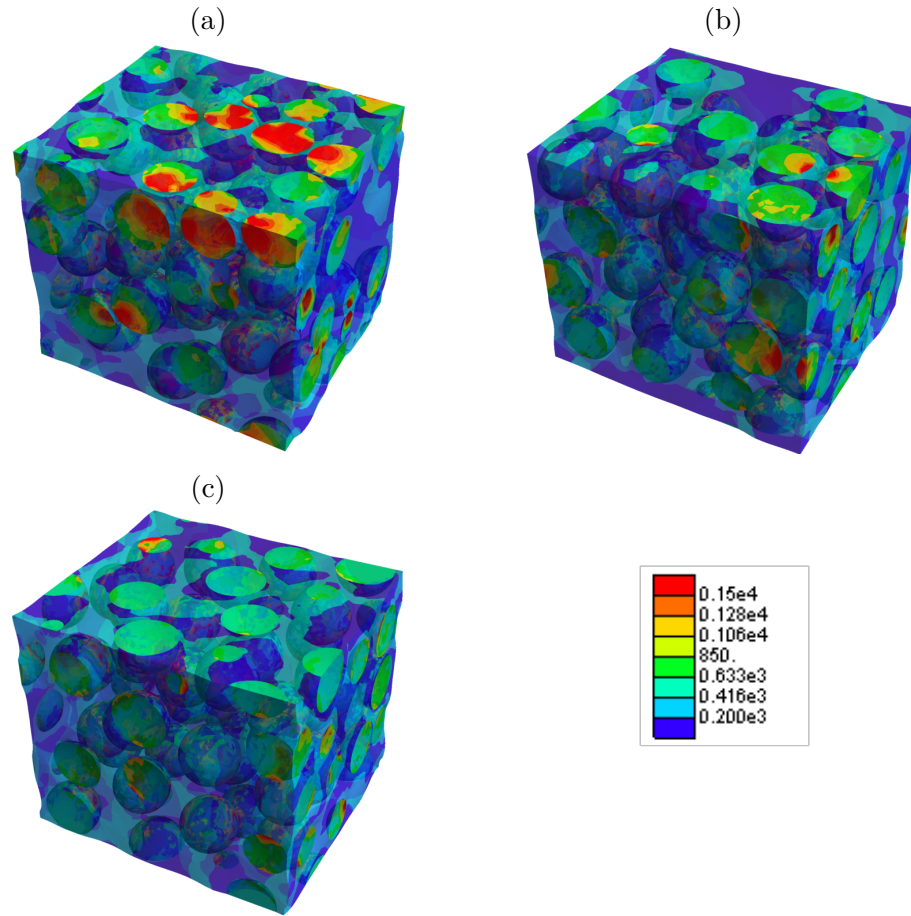
Inaczej niż dla poprzednich testów efektywny moduł ścinania otrzymany z symulacji MES struktur SVE charakteryzuje się większym rozrzutem wyników. Źródłem rozrzutu wyników jest liczba sferycznych wtrąceń i tym samym stopień reprezentatywności wygenerowanych losowych kompozytów – o ile dla testów przewodzenia ciepła i modułu objętościowego kompozytu  $n_{inc} = 50$  jest wystarczająca (niewielki rozrzut wyników na Rys.4.11 i Rys.4.12) o tyle dla testu izochorycznego rozciągania zwiększenie liczby wtrąceń zmniejszyłoby rozrzut wyników. Niemniej rozrzut wyników efektywnego modułu ścinania na Rys.4.13 jest zdecydowanie mniejszy niż rozrzut rezultatów podobnej analizy opublikowanych w [55], w której SVE zawierały  $n_{inc} = 30$ , miały rzadszą siatkę elementów skończonych i dwukrotnie większy kontrast modułów ścinania faz. Na Rys.4.13.b przedstawiono obliczony efektywny moduł ścinania około 100 struktur SVE, co pozwala pokazać ogólny trend efektu upakowania wtrąceń. Podobnie jak w przypadku modułu objętościowego zmniejszenie się wartości parametru upakowania usztywnia efektywną odpowiedź kompozytu zbrojonego twardymi wtręciami ( $G_{inc}/G_m = 5$ ).



Rysunek 4.13: Stosunek efektywnego modułu ścinania  $\bar{G}$  do modułu ścinania osnowy  $G_m$  vs. parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna SVE. Parametry materiałowe wtrąceń  $(K_{inc}, G_{inc}) = (10, 5)$ . (a) udział objętościowy wtrąceń  $f_{inc}$  zgodnie z legendą, (b)  $f_{inc} = 10\%$ .

**Odpowiedź sprężysto-plastyczna.** Aby oszacować wpływ parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  na efektywną odpowiedź sprężysto-plastyczną dwufazowego kompozytu MMC (Tab.2.3) wygenerowano około 100 losowych mikrostruktur z 50 sferycznymi wtrąceniami o udziale objętościowym  $f_{inc} = 30\%$ . Na rys.4.14 przedstawiono wybrane mikrostruktury o parametrze upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ : (a) 0.039, (b) 0.164, (c) 0.260, oraz pola naprężenia ekwiwalentnego Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  dla  $\varepsilon = 3\%$  w teście izochorycznego rozciągania. Legenda wartości  $\sigma_{Mises}$  znajduje się na Rys.4.14.

Dla mniejszych wartości parametru upakowania, np.  $\bar{\lambda}/(2R_{inc}) = 0.039$  Rys.4.14.a, zaobserwowano wyższe naprężenia ekwiwalentne Hubera-Misesa – kolor czerwony zgodnie z legendą Rys.4.14 – niż dla większych wartości upakowania wtrąceń Rys.4.14.b i c. W kompozycie MMC przyjęto fazę wtrąceń jako sprężystą, natomiast fazę osnowy jako sprężysto-plastyczną. Ze względu na duży kontrast granicy uplastycznienia faz kompozytu bliskie sąsiedztwo wtrąceń w kompozycie jest obszarem koncentracji ekstremalnych wartości naprężenia ekwiwalentnego Hubera-Misesa. W modelach mikromechanicznych średniego pola zakłada się jednorodne pola mechaniczne w rozproszonej fazie cząstek. Na przykładzie mikrostruktur z Rys.4.14 zauważono pola mechaniczne wtrąceń bliższe jednorodnym dla większych wartości parametrów upakowania (Rys.4.14.c).

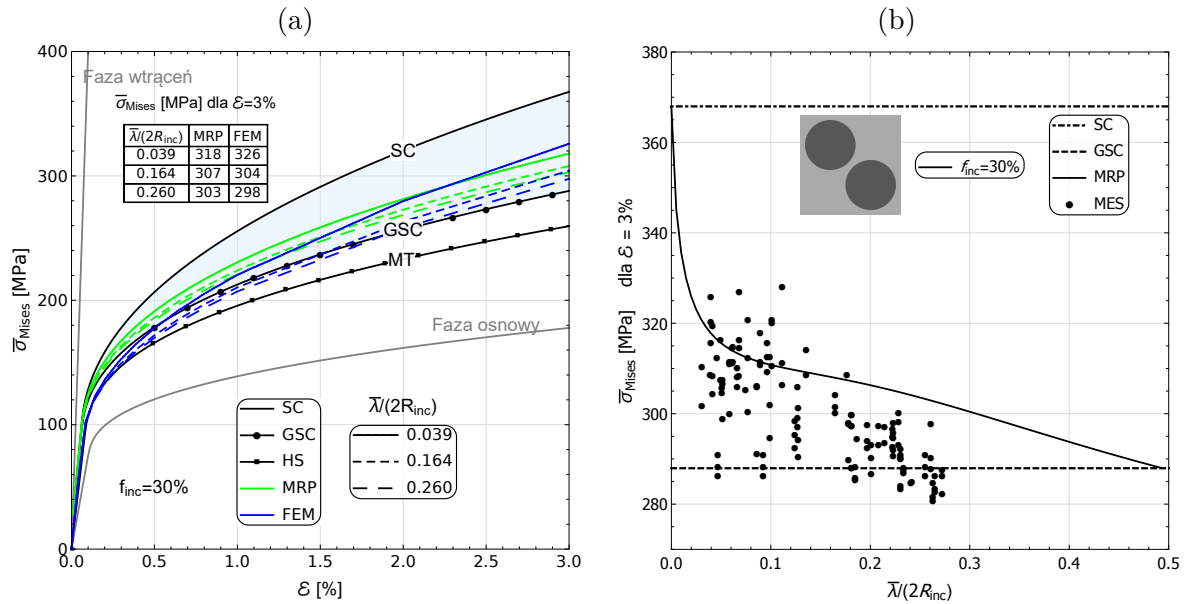


Rysunek 4.14: Wyniki analizy MES. Naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  [MPa] dla  $\varepsilon = 3\%$  kompozytu MMC ( $f_{inc} = 30\%$ ) w teście izochorycznego rozciągania, wybranych losowych mikrostruktur o parametrze upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  kolejno: (a) 0.039 , (b) 0.164 , (c) 0.260.

Na Rys.4.15 zaprezentowano oszacowanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej kompozytu MMC z udziałem objętościowym wtrąceń  $f_{inc} = 30\%$  w teście izochorycznego rozciągania. W podpunkcie (a) na Rys.4.15 pokazano oszacowanie relacji efektywnego naprężenia ekwiwalentnego Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  od wartości odkształcenia  $\varepsilon$  w kierunku rozciągania modelami mikro-mechanicznymi: SC, GSC i MT, oraz MRP dla parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  struktur z Rys.4.14. W początkowej fazie odkształcenia  $\varepsilon < 0.5\%$  efektywne naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa wyznaczone za pomocą MES mikrostruktur z Rys.4.14 znajduje się poniżej oszacowania GSC i powyżej oszacowania modelem Mori-Tanaka. W dalszej fazie odkształcenia wyniki homogenizacji numerycznej mieszczą się między oszacowaniami schematu samozgodnego i jego uogólnieniem. Wartości  $\sigma_{Mises}$  dla  $\varepsilon = 3\%$  otrzymane homogenizacją MES i modelem MRP dla mikrostruktur z Rys.4.14 (identyfikowanych poprzez parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ ) wypisano w tabeli na Rys.4.15.a. Pomimo różnic w wynikach w początkowej fazie odkształcenia ( $\varepsilon < 0.5\%$ ) między podejściem analitycznym MRP i numerycznym MES, rezultaty  $\sigma_{Mises}$  dla



końcowego odkształcenia  $\varepsilon = 3\%$  są w dobrej zgodności.



Rysunek 4.15: Oszacowanie odpowiedzi sprężysto-plastycznej kompozytu MMC ( $f_{inc} = 30\%$ ) w teście izochorycznego rozciągania. (a) Naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  vs. składowa odkształcenia  $\varepsilon$  w kierunku rozciągania, wybranych mikrostruktur  $\bar{\lambda}/(2R_{inc}) = 0.039, 0.164$  i  $0.260$  z Rys.4.14. (b) Naprężenie ekwiwalentne Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  dla  $\varepsilon = 3\%$  vs. parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MT – model Mori-Tanaka, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. W każdym przypadku zastosowano linearyzację styczną. MES – homogenizacja numeryczna SVE.

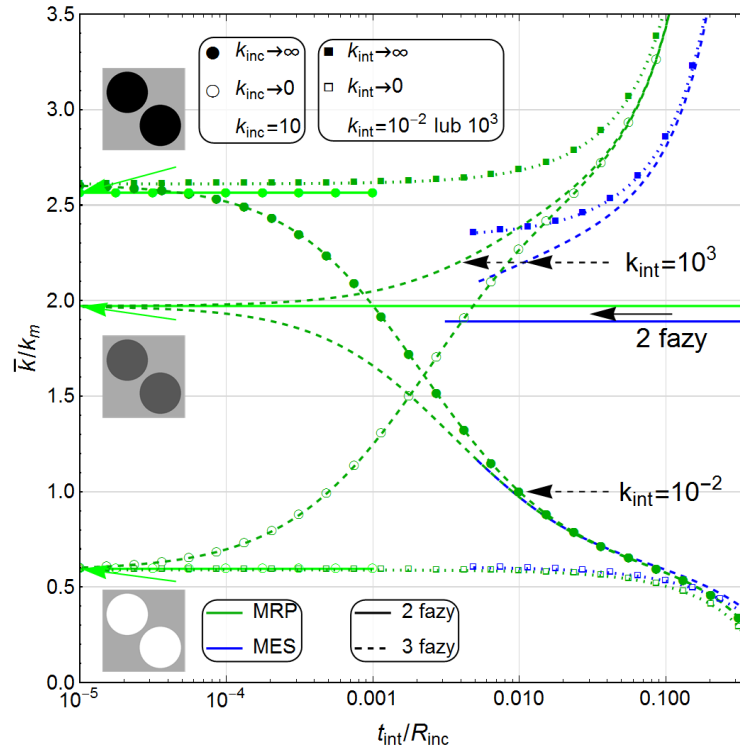
Aby pokazać wpływ upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  na efektywną odpowiedź kompozytu na wykresie Rys.4.15.b zaprezentowano wyniki dotyczące efektywnego naprężenia ekwiwalentnego Hubera-Misesa  $\sigma_{Mises}$  dla odkształcenia  $\varepsilon = 3\%$  w kierunku rozciągania. Wyniki analityczne dla modeli mikromechanicznych: SC, GSC oraz MRP otrzymano stosując linearyzację styczną. Wyniki homogenizacji numerycznej SVE oznaczono punktami na Rys.4.15.b. Wygenerowane losowe struktury o liczbie sferycznych wtrąceń  $n_{inc} = 50$  charakteryzują się dużym rozrzutem wyników, który jest w tym przypadku większy niż dla modułu ścinania (Rys.4.13). Wyniki około 100 realizacji struktur SVE pozwalają oszacować trend charakteryzujący wpływ parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  na odpowiedź sprężysto-plastyczną kompozytu MMC otrzymaną za pomocą homogenizacji numerycznej. Wraz ze spadkiem parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  wzrasta efektywne naprężenie płynięcia kompozytu dla danego poziomu odkształcenia. Kształt krzywej wyników MRP na Rys.4.15.b jest różny od poprzednich wyników np. Rys.4.13. Zmiana kształtu krzywej wynika z zastosowania linearyzacji w podejściu MRP. Należy również podkreślić, że na wykresie prezentowana jest wartość naprężenia, a nie aktualnego modułu sztywności.

## 4.4 Analiza wpływu rozmiaru wtrąceń

W niniejszym podrozdziale zaprezentowano wyniki dotyczące oszacowań właściwości efektywnych dla kompozytów trójfazowych: osnowa, wtrącenia i międzyfaza (ang. interphase, skrót int) będąca powłoką o grubości  $t_{\text{int}}$  wokół wtrąceń. Wpływ rozmiaru wtrąceń oraz międzyfazy na efektywne parametry materiałowe przeanalizowano dla zmiennego stosunku grubości międzyfazy  $t_{\text{int}}$  do promienia wtrąceń  $R_{\text{inc}}$  oraz różnych parametrów materiałowych międzyfazy ( $k_{\text{int}}, K_{\text{int}}, G_{\text{int}}$ ). Parametr rozmiaru wtrąceń  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  jest wielkością bezwymiarową. Zauważmy, że przy założeniu stałej grubości międzyfazy, wraz ze wzrostem rozmiaru wtrąceń wartość przyjętego parametru maleje.

Na Rys.4.16 zaprezentowano zmianę efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  w funkcji parametru rozmiaru wtrąceń  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$ . Parametr rozmiaru wtrąceń  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  jest określony na osi X w skali logarytmicznej o podstawie 10. Na wykresie 4.16 porównano oszacowania modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu oraz homogenizacji numerycznej komórki jednostkowej o regularnym układzie położenia wtrąceń RC. Współczynnik przewodzenia ciepła osnowy przyjęto jako stały równy  $k_{\text{m}} = 1$ . W kompozytach trójfazowych współczynnik przewodzenia międzyfazy jest równy  $k_{\text{int}} = 10^3$  lub  $k_{\text{int}} = 10^{-2}$  (zgodnie z opisem na Rys.4.16). Współczynnik przewodzenia wtrąceń jest równy  $k_{\text{inc}} = 10$  lub dąży do nieskończoności (przypadek superprzewodzących wtrąceń) bądź zera (przypadek kompozytu z pustkami).

Suma udziałów objętościowych w faz kompozycie jest równa jeden  $\sum_{i=1}^n f_i = 1$ . Udziały objętościowe faz w kompozycie najczęściej określa się poprzez ustalenie udziału objętościowego wtrąceń  $f_{\text{inc}}$ . W kompozytach dwufazowych, faza wtrąceń (inc) i faza osnowy (m), mamy  $f_{\text{m}} = 1 - f_{\text{inc}}$  a zatem  $f_{\text{inc}}/f_{\text{m}} = f_{\text{inc}}/(1 - f_{\text{inc}})$ , natomiast wprowadzając międzyfazę (int) mamy kompozyt trójfazowy, w którym  $f_{\text{m}} = 1 - f_{\text{inc}} - f_{\text{int}}$  a zatem  $f_{\text{inc}}/f_{\text{m}} = f_{\text{inc}}/(1 - f_{\text{inc}} - f_{\text{int}})$ . Jeżeli założymy udział objętościowy fazy wtrąceń jako stały  $f_{\text{inc}} = \text{const.}$  to wraz ze zmianą parametru rozmiaru wtrąceń  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  w kompozytach trójfazowych stosunek  $f_{\text{inc}}/f_{\text{m}}$  będzie zmienny ze względu na zależność  $f_{\text{int}}$  od  $t_{\text{int}}$ . Dlatego w niniejszym podrozdziale rozprawy doktorskiej geometrię mikrostruktury kompozytu ( $R_{\text{inc}}, t_{\text{int}}, f_{\text{m}}$ ) dobrano tak, aby stosunek udziału objętościowego fazy wtrąceń do udziału objętościowego fazy osnowy był stały i równy  $f_{\text{inc}}/f_{\text{m}} = 3/7$ , co odpowiada  $f_{\text{inc}} = 30\%$  dla  $f_{\text{int}} = 0\%$ . Takie podejście pozwala określić wpływ rozmiaru wtrąceń na efektywne parametry materiałowe kompozytu bez zaburzenia końcowych wyników zmiennym stosunkiem  $f_{\text{inc}}/f_{\text{m}}$ .



Rysunek 4.16: Efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu  $\bar{k}$  vs. parametr rozmiaru wtrąceń  $t_{int}/R_{inc}$  (oś X skala logarytmiczna). MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu dla układu położenia wtrąceń RC. MES – homogenizacja numeryczna komórki jednostkowej RC. Współczynnik przewodzenia osnowy jest równy  $k_m = 1$ , natomiast wtrąceń zgodnie z oznaczeniami legendy jest równy  $k_{inc} = 10$  lub dąży do nieskończoności bądź zera. Współczynnik przewodzenia międzyfazy jest równy  $k_{int} = 10^3$  lub  $k_{int} = 10^{-2}$ . Stosunek udziału objętościowego wtrąceń do udziału objętościowego matrycy przyjęto  $f_{inc}/f_m = 3/7$ , co odpowiada  $f_{inc} = 30\%$  dla  $f_{int} = 0\%$ .

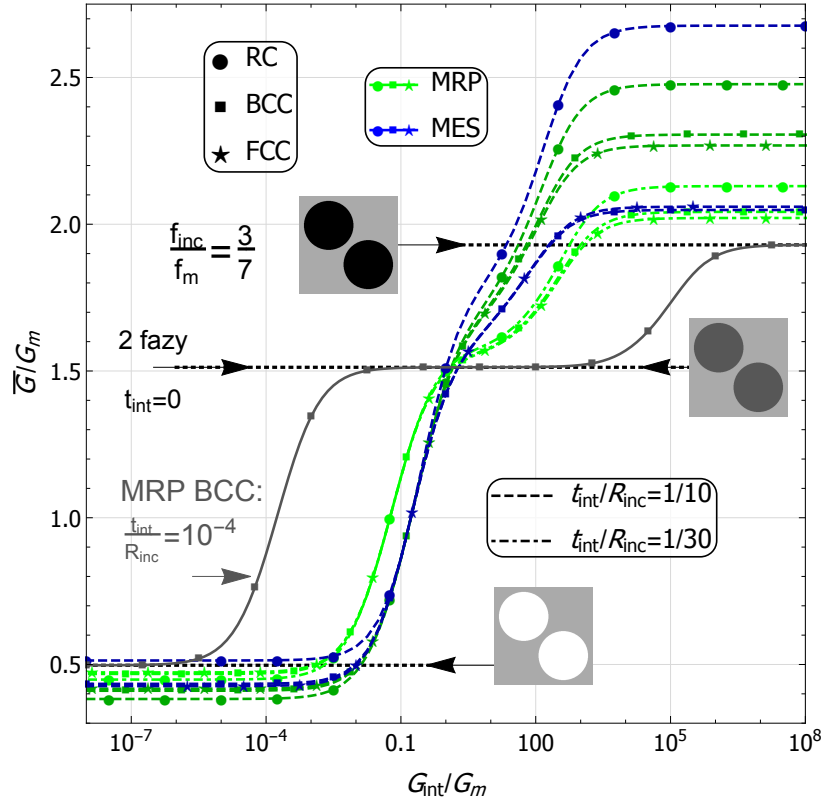
W kompozytach dwufazowych z perfekcyjnym połączeniem faz rozmiar wtrąceń nie wpływa na efektywne parametry materiałowe (poziome linie na wykresie 4.16). Natomiast jeśli między osnową a zbrojeniem występuje trzecia faza, tzw. międzyfaza, wtedy efektywne parametry materiałowe zależą od rozmiaru wtrąceń. Jak pokazano wcześniej istnienie międzyfazy może być utożsamiane z założeniem niedoskonałego połączenia na interfejsie wtrącenie/osnowa, np. nieciągłość przemieszczeń (liniowy model podatnego interfejsu, podrozdział 2.3.2) czy nieciągłość pola temperatury (opór cieplny Kapitzy, podrozdział 2.2.2) na granicy faz. Oszacowany efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu trójfazowego (linie przerywane Rys.4.16) wraz ze spadkiem wartości parametru rozmiaru wtrąceń dąży do efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu dwufazowego z perfekcyjnym przewodzeniem faz. Efektywne współczynniki przewodzenia ciepła kompozytu trójfazowego i dwufazowego są już prawie jedna-

kowe dla  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} \leq 10^{-4}$  niezależnie od współczynnika przewodzenia ciepła wtrąceń ( $k_{\text{inc}} = 10$  brak znaczników,  $k_{\text{inc}} \rightarrow 0$  znaczki  $\circ$ ,  $k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$  znaczki  $\bullet$ ). Warto podkreślić znaczenie jakości połączeń faz kompozytu na jego efektywne właściwości. Przykładowo kompozyt zbrojony super przewodzącymi wtręciami  $k_{\text{inc}} \rightarrow \infty$ , w którym występuje słabo przewodząca międzyfaza  $k_{\text{int}} = 10^{-2}$ , ma właściwości gorsze od kompozytu dwufazowego z  $k_{\text{inc}} = 10$  dla około  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} > 10^{-3}$ . Z drugiej strony kompozyt z pustkami w "płaszczach" o  $k_{\text{int}} = 10^{+3}$  ma lepsze właściwości przewodzenia ciepła od kompozytu dwufazowego z  $k_{\text{inc}} = 10$  dla około  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} > 0.007$ .

Homogenizację numeryczną trójfazowego kompozytu wykonano dla parametru upakowania  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} > 1/50$ . Dla mniejszych wartości parametru upakowania program NetGen, wykorzystywany do generacji siatki elementów skończonych, nie realizował dyskretyzacji geometrii mikrostruktury ze względu na małą wartość grubości powłoki  $t_{\text{int}}$ . Niemniej z wyników symulacji numerycznych przepływu ciepła dla  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} > 1/50$  (Rys.4.16) można wnioskować, że parametry materiałowe uzyskane z homogenizacji numerycznej będą zachowywać się podobnie jak oszacowane właściwości kompozytu za pomocą modelu MRP. Szczególnie dobrą zgodność wyników uzyskano dla kompozytu trójfazowego z międzyfazą o niższym współczynniku przenikania ciepła niż pozostałe fazy kompozytu (na Rys.4.16 przerywane linie dla  $k_{\text{int}}$  dążącego do zera lub równego  $10^{-2}$ ).

Analogiczne wnioski wyciągnięto dla wyników dotyczących efektywnego modułu objętościowego i ścinania kompozytów. Część wyników wpływu parametru upakowania na właściwości sprężyste kompozytu opublikowano w pracy [55]. Moduł objętościowy jak i moduł ścinania kompozytu trójfazowego dąży do oszacowanego  $\bar{K}$  i  $\bar{G}$  kompozytu dwufazowego gdy  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} \rightarrow 0$ . Podobnie jak na Rys.4.16 dla współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu z super wtręciami i pustkami wyniki efektywnych właściwości sprężystych w znaczącym stopniu zależą od parametru rozmiaru wtrąceń i właściwości międzyfazy, co pokazano na Rys.4.17.

Na Rys.4.17 zaprezentowano zmianę efektywnego modułu ścinania kompozytu  $\bar{G}$  w funkcji modułu ścinania międzyfazy  $G_{\text{int}}$  określonego na osi X (skala logarytmiczna o podstawie 10). Efektywny moduł ścinania oszacowano modelem morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu oraz homogenizacją numeryczną komórki jednostkowej. Układ wtrąceń w kompozycie przyjęto jak w regularnej sieci krystalograficznej: prostej, ściennie centrowanej bądź przestrzennie centrowanej. Moduł ścinania osnowy  $G_{\text{m}}$  jest równy 1. W kompozytach trójfazowych, z międzyfazą o grubości  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  równej  $1/10$  lub  $3/10$  w stosunku do promienia wtrąceń, moduł ścinania wtrąceń jest równy  $G_{\text{inc}} = 5$ . Stosunek udziału objętościowego wtrąceń do udziału objętościowego matrycy przyjęto  $f_{\text{inc}}/f_{\text{m}} = 3/7$ , co odpowiada  $f_{\text{inc}} = 30\%$  jeżeli  $f_{\text{int}} = 0\%$ . Dodatkowo na wykresie 4.17 pokazano efektywny moduł ścinania  $\bar{G}$  kompozytu trójfazowego z układem wtrąceń BCC oraz z  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} = 10^{-4}$ , oszacowany podejściem MRP, oznaczony kolorem szarym. Poziome przerywane czarne linie na Rys.4.17 to oszacowany metodą MRP efektywny moduł ścinania kompozytu dwufazowego o układzie wtrąceń BCC i ich module ścinania odpowiednio  $G_{\text{inc}} \rightarrow \infty$ ,  $G_{\text{inc}} = 5$ ,  $G_{\text{inc}} \rightarrow 0$  (w kolejności od góry wykresu).



Rysunek 4.17: Efektywny moduł ścinania kompozytu  $\bar{G}$  vs. moduł ścinania międzyfazy  $G_{\text{int}}$  (oś X skala logarytmiczna). MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. MES – homogenizacja numeryczna komórki jednostkowej. Układy krystalograficzne: RC – prosty, BCC – ściennie centrowany, FCC – przestrzennie centrowany. Parametry materiałowe kompozytu:  $G_m = 1$ ,  $G_{\text{inc}} = 5$  oraz  $G_{\text{int}}$  oś X. Wyniki dla parametru rozmiaru wtrąceń  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$  równego 1/10 lub 3/10. Stosunek udziału objętościowego wtrąceń do udziału objętościowego matrycy przyjęto  $f_{\text{inc}}/f_m = 3/7$ , co odpowiada  $f_{\text{inc}} = 30\%$  jeżeli  $f_{\text{int}} = 0\%$ . Dodatkowo  $\bar{G}$  dla układu BCC oszacowany metodą MRP z  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} = 10^{-4}$  oznaczono kolorem szarym oraz pokazano jego asymptoty: poziome przerywane czarne linie  $\bar{G}$  kompozytu dwufazowego ( $t_{\text{int}} = 0$ ) o  $G_m = 1$  i kolejno od góry  $G_{\text{inc}} \rightarrow \infty$ ,  $G_{\text{inc}} = 5$ ,  $G_{\text{inc}} \rightarrow 0$ .

Jeżeli moduł ścinania międzyfazy dąży do nieskończoności  $G_{\text{int}}/G_m \rightarrow \infty$  (odpowiednio do zera  $G_{\text{int}}/G_m \rightarrow 0$ ), co odpowiada sztywnej powłoce (odpowiednio super podatnej powłoce), to efektywny moduł ścinania kompozytu trójfazowego  $\bar{G}^{(3)}$  jest równy efektywnemu modułowi ścinania kompozytu dwufazowego  $\bar{G}^{(2)}$  ze sztywnymi wtrąceniami (odpowiednio pustkami) o udziale objętościowym  $f_{\text{inc}}^{(2)} = f_{\text{inc}}^{(3)} + f_{\text{int}}^{(3)}$ . Na Rys.4.17 jest to szczególnie widoczne na przykładzie efektywnego modułu ścinania  $\bar{G}$  przy  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} = 10^{-4}$  oznaczonego kolorem szarym. Dla  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} = 10^{-4}$  udział objętościowy międzyfazy jest znacznie mniejszy od udziału objętościowego pozostałych faz  $f_{\text{int}} \ll f_{\text{inc}} < f_m$ . W konsekwencji efektywny moduł ścinania  $\bar{G}^{(3)}$

takiego trójfazowego kompozytu jest w przybliżeniu równy efektywnemu modułowi ścinania kompozytu osnowy z pustkami  $\bar{G}^{(3)} \approx \bar{G}_{(G_{\text{inc}} \rightarrow 0)}^{(2)}$  gdy  $G_{\text{int}}/G_{\text{m}} < 10^{-6}$ , oraz dla  $G_{\text{int}}/G_{\text{m}} > 10^7$  efektywny moduł ścinania  $\bar{G}^{(3)}$  dąży do modułu ścinania kompozytu ze sztywnymi wtrąceniami  $\bar{G}^{(3)} \approx \bar{G}_{(G_{\text{inc}} \rightarrow \infty)}^{(2)}$ . Dodatkowo można wyróżnić zakres przejściowy efektywnych parametrów materiałowych w funkcji właściwości międzyfazy, gdy parametr rozmiaru wtrąceń jest mały. Na Rys.4.17 dla kompozytu z  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} = 10^{-4}$  efektywny moduł ścinania takiego trójfazowego kompozytu  $\bar{G}^{(3)}$  jest w przybliżeniu równy efektywnemu modułowi ścinania kompozytu dwufazowego  $\bar{G}^{(3)} \approx \bar{G}^{(2)}$  dla  $10^{-1} < G_{\text{int}}/G_{\text{m}} < 10^3$ , to znaczy wpływ międzyfazy na efektywne parametry materiałowe kompozytu jest wtedy pomijalny.

Efektywny moduł ścinania kompozytu trójfazowego oszacowano w symulacjach numerycznych testu ścinania Eq.3.9.2 z wykorzystaniem MES dla parametru upakowania  $t_{\text{int}}/R_{\text{inc}} = 1/10$ . Na Rys.4.17 charakter krzywych  $\bar{G}(G_{\text{int}})$  jest podobny do wyników podejścia MRP. Dla  $G_{\text{int}}/G_{\text{m}} > 10$  różnica między wynikami RC i BCC/FCC jest większa w przypadku homogenizacji numerycznej MES niż w oszacowaniach modelem MRP. W układzie RC komórki jednostkowej rezultat MRP jest mniejszy niż wyniki MES, natomiast w układach BCC i FCC kolejność jest odwrotna: oszacowania MRP są powyżej rezultatów homogenizacji numerycznej. Dla super twardej międzyfazy  $G_{\text{int}}/G_{\text{m}} > 10^4$  rozbieżność wyników MRP i homogenizacji numerycznych MES jest znaczna, natomiast dla kompozytów z podatną międzyfazą  $G_{\text{int}}/G_{\text{m}} < 10^{-3}$  wyniki  $\bar{G}/G_{\text{m}}$  MRP i MES są na zbliżonym poziomie.

Analogiczne wyniki i wnioski wyciągnięto z symulacji efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła oraz modułu objętościowego kompozytów trójfazowych w kontekście parametrów materiałowych międzyfazy. Część wyników została opublikowana w artykule [55]. Parametry materiałowe międzyfazy mają dominujący wpływ na efektywną odpowiedź kompozytu w przypadku gdy są one o kilka rzędów różne od właściwości pozostałych faz kompozytu. Zarówno współczynnik przewodzenia ciepła jak i moduł objętościowy kompozytu wykazują wyższe wartości przy odpowiednio  $k_{\text{int}}/k_{\text{m}} > k_{\text{inc}}/k_{\text{m}}$  lub  $K_{\text{int}}/K_{\text{m}} > K_{\text{inc}}/K_{\text{m}}$ , analogicznie, sytuacja jest odwrotna, gdy  $k_{\text{int}}/k_{\text{m}} < k_{\text{inc}}/k_{\text{m}}$  lub  $K_{\text{int}}/K_{\text{m}} < K_{\text{inc}}/K_{\text{m}}$ . Na podstawie wykonanych symulacji numerycznych i oszacowań analitycznych można stwierdzić, że określenie wpływu międzyfazy na efektywne parametry materiałowe kompozytu powinno uwzględniać grubość międzyfazy  $t_{\text{int}}$  oraz jej właściwości (w rozprawie doktorskiej są to  $K_{\text{int}}$ ,  $G_{\text{int}}$  i  $k_{\text{int}}$ ).

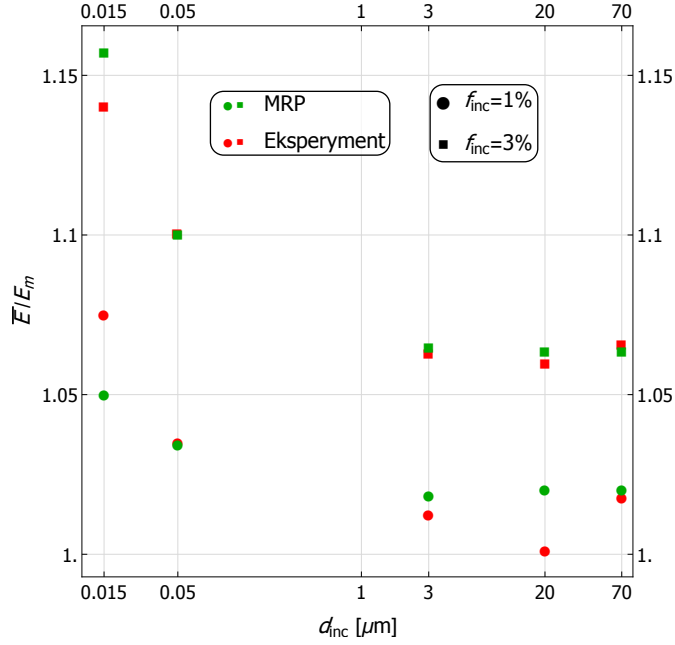
## 4.5 Porównanie przewidywań modelu MRP z rezultatami badań doświadczalnych

**Wpływ rozmiaru wtrąceń.** Wpływ rozmiaru wtrąceń na efektywne parametry materiałowe kompozytu był obserwowany w badaniach doświadczalnych. Przykład takich wyników zaczerpniętych z pracy Cho i in. [23] pokazano na Rys.4.18, na którym zaprezentowano wpływ rozmiaru wtrąceń na efektywne parametry materiałowe kompozytu wyznaczone w eksperymentach. Przedmiotem eksperymentu opisanego w pracy Cho i in. [23] był efektywny moduł Younga  $\bar{E}$  kompozytu o osnowie polimerowej (ester winylu) o parametrach sprężystych:  $E_m = 3.5$  [GPa] i  $\nu_m = 0.35$  oraz fазie wtrąceń tlenku glinu  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Wtrącenia miały kształt sferyczny. Wykonano kompozyty o różnych średnicach wtrąceń  $d_{\text{inc}} = (0.015, 0.05, 3, 20, 70)$  [ $\mu\text{m}$ ]. Wtrącenia mają jednakowy współczynnik Poissona  $\nu_{\text{inc}} = 0.22$ , zaś moduł Younga zależy od ich średnicy: dla  $d_{\text{inc}} > 1$  [ $\mu\text{m}$ ]  $E_{\text{inc}} = 347$  [GPa], natomiast dla  $d_{\text{inc}} < 1$  [ $\mu\text{m}$ ]  $E_{\text{inc}} = 145$  [GPa]. Parametry materiałowe faz kompozytu wypisano w Tab.4.1.

Faza	Osnowa ester winylu	Wtrącenia $\text{Al}_2\text{O}_3$ $d_{\text{inc}}$ nano	Wtrącenia $\text{Al}_2\text{O}_3$ $d_{\text{inc}}$ mikro
Moduł Younga, $E$ [GPa]	3.5	145	347
Współczynnik Poissona, $\nu$	0.35	0.22	0.22
Średnica wtrąceń $d_{\text{inc}}$ [ $\mu\text{m}$ ]	-	0.015, 0.05	3, 20, 70

Tabela 4.1: Parametry materiałowe kompozytu o osnowie polimerowej zbrojonej wtrąceniami z tlenku glinu  $\text{Al}_2\text{O}_3$  o różnej średnicy wtrąceń  $d_{\text{inc}}$ , dane z pracy Cho i in. [23]

Oprócz wyników badań doświadczalnych na Rys.4.18 zaprezentowano oszacowania efektywnego modułu Younga modelem morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. W modelu MRP wprowadzono międzyfazę o parametrach:  $E_{\text{int}} = 7250$  [GPa],  $\nu_{\text{int}} = 0.22$ ,  $t_{\text{int}} = 1.5$  [nm] oraz przyjęto upakowanie  $\bar{\lambda} = 4 d_{\text{inc}}$ . Wartość parametru upakowania przyjęto w sposób przybliżony na podstawie obrazów mikrostruktury zamieszczonych w publikacji [23]. Oszacowanie efektywnych parametrów materiałowych modelem MRP zmienia się monotonicznie względem parametru rozmiaru wtrąceń. Innymi słowy w podejściu MRP możemy wprowadzić międzyfazę o parametrach materiałowych wyższych niż pozostałe fazy, bądź niższych, i wraz ze wzrostem parametru rozmiaru wtrąceń uzyskać odpowiednio podwyższenie bądź obniżenie wartości efektywnych parametrów materiałowych kompozytu. Natomiast w wynikach badań eksperymentalnych na Rys.4.18 odnotowano obniżenie się efektywnego modułu Younga dla  $d_{\text{inc}} = 20$  [ $\mu\text{m}$ ] w stosunku do  $d_{\text{inc}} = 70$  [ $\mu\text{m}$ ]. Zaś dla mniejszych średnic wtrąceń  $d_{\text{inc}} < 3$  [ $\mu\text{m}$ ] podwyższenie wartości  $\bar{E}$ . W schemacie MRP wprowadza się międzyfazę o grubości  $t_{\text{int}}$ , która w skali mikro nie wpływa na efektywne parametry materiałowe, a manifestuje swoją obecność w skali nano, stąd też nie można uzyskać pogorszenia właściwości obserwowanego dla  $d_{\text{inc}} = 20$  [ $\mu\text{m}$ ]. Dla większości rozmiarów wtrąceń model MRP dobrze opisuje wyniki uzyskane w pracy [23].



Rysunek 4.18: Efektywny moduł Younga  $\bar{E}$  vs. średnica wtrąceń  $d_{int} [\mu m]$  (oś X skala logarytmiczna). MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. Eksperyment – badania doświadczalne z publikacji Cho i in. [23]. Parametry materiałowe kompozytu: osnowa – ester winylu  $E_m = 3.5$  [GPa],  $\nu_m = 0.35$ ; wtrącenia – tritlenek diglinu  $Al_2O_3$  o  $\nu_{inc} = 0.22$ ,  $E_{inc}$  dla  $d_{inc} > 1 [\mu m]$  jest równe 347 [GPa], zaś dla  $d_{inc} < 1 [\mu m]$   $E_{inc} = 145$  [GPa]. W modelu MRP wprowadzono międzyfazę o parametrach:  $E_{int} = 7250$  [GPa],  $\nu_{int} = 0.22$ ,  $t_{int} = 1.5$  [nm]. Parametr upakowania w modelu MRP przyjęto  $\bar{\lambda}/d_{inc} = 4$ .

**Jednoczesne oszacowanie modułu Younga i współczynnika przewodzenia ciepła modelem MRP – weryfikacja rezultatów badaniami doświadczalnymi.** Zależność parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  od  $f_{inc}$ , opór cieplny Kapitzy  $\alpha$  (podrozdział 2.2.2) dla  $\bar{k}$ , podatny interfejs  $(\eta, \mu)$  (podrozdział 2.3.2) dla  $\bar{E}$ , są parametrami w modelu MRP, których wartości można dobrać tak, aby dopasować wyniki podejścia MRP z rezultatami badań doświadczalnych. Parametr upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  w modelu MRP zależy od geometrii mikrostruktury. Zmiana parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  w funkcji  $f_{inc}$  jest jednakowa w oszacowaniu efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  i modułu Younga  $\bar{E}$ , dlatego parametr upakowania w modelu MRP może być wykorzystany do jednoczesnego oszacowania różnych parametrów materiałowych kompozytu (ang. cross-property relationship). Dla regularnego układu położeń wtrąceń ściennie centrowanego FCC zależność parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{inc})$  od  $f_{inc}$  jest określona formułą:

$$\frac{\bar{\lambda}}{2R_{inc}} = \left( \frac{\sqrt{2\pi}}{6f_{inc}} \right)^{1/3} - 1. \quad (4.9)$$



Jednak przyjęcie odpowiedniej zależności parametru upakowania  $\bar{\lambda}/(2R_{\text{inc}})$  od  $f_{\text{inc}}$  dla kompozytów z losowym położeniem wtrąceń nie jest oczywiste. Na podstawie analizy wpływu parametru upakowania z podrozdziału 4.3 na efektywne parametry materiałowe kompozytu wywnioskowano, że krzywa wyników homogenizacji numerycznej SVE może z powodzeniem być aproksymowana funkcją  $f(x) = (x + a)^{-b} + c$ , w której są identyfikowane trzy dodatnie parametry:  $a$ ,  $b$  i  $c$ . Podobny charakter krzywej zaobserwowano w wynikach modelu MRP. Ponieważ wyniki modelu MRP w funkcji  $\bar{\lambda}(f_{\text{inc}})$  znajdują się między rezultatami SC i GSC, analogicznie jak w rozdziale 4.3 w funkcji parametru upakowania, przyjęto zależność  $\bar{\lambda}$  w funkcji  $f_{\text{inc}}$  upraszczając postać  $f(x) = (x + a)^{-b} + c$ . Dlatego, aby dopasować wyniki modelu MRP do rezultatów badań eksperymentalnych z pracy [128], przyjęto poniższą zależność  $\mathcal{F}_\lambda$  opisującą zmianę parametru upakowania  $\bar{\lambda}$  w funkcji  $f_{\text{inc}}$ :

$$\mathcal{F}_\lambda(f_{\text{inc}}) = P_\lambda \cdot \frac{\sqrt{2}\pi/6 - f_{\text{inc}}}{f_{\text{inc}}}, \quad (4.10)$$

w której  $f_{\text{inc}} > 0$  oraz stała  $P_\lambda$  służy do dopasowania oszacowania MRP do wyników badań eksperymentalnych.

Na rysunkach 4.19 i 4.20 zaprezentowano oszacowanie efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła (a) oraz efektywnego modułu Younga (b) kompozytu dwufazowego na podstawie badań doświadczalnych opublikowanych w pracy Wong i in. [128]. Parametry materiałowe faz kompozytu wypisano w Tab.4.2.

Faza	Osnowa: żywica epoksydowa	Wtrącenia glin (Rys.4.19)	Wtrącenia SCAN (Rys.4.20)
Moduł Younga, $E$ [GPa]	2.25	385	330
Współczynnik Poissona, $\nu$	0.19	0.24	0.25
Współczynnik przewodzenia ciepła, $k$ [ $\frac{\text{W}}{\text{mK}}$ ]	0.195	36	220

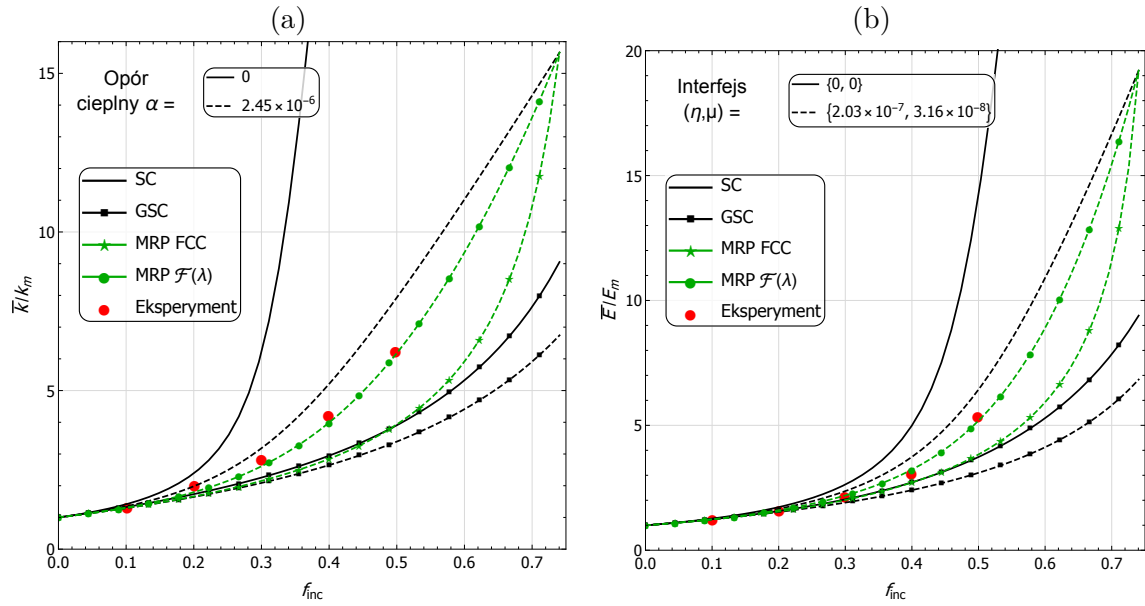
Tabela 4.2: Parametry materiałowe kompozytu o osnowie epoksydowej zbrojonej wtrąceniami z gliny (Rys.4.19) lub SCAN (Rys.4.20) [128]

W obydwu przykładach 4.19 i 4.20 osnowa jest wykonana z żywicy epoksydowej. Na Rys.4.19 osnowa jest zbrojona gliną, natomiast na Rys.4.20 faza zbrojenia jest wykonana z materiału SCAN (ang. Silica-Coated Aluminum Nitride).

Maksymalny udział objętościowy fazy zbrojenia w kompozycie dla sfer o jednakowym kształcie to  $f_{\text{inc}} = f^{\text{FCC}} = \sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$  (Eq.3.6). Wyniki badań doświadczalnych z [128],  $k_{\text{eksp}}$  i  $E_{\text{eksp}}$ , dotyczą  $f_{\text{inc}} = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$  lub  $0.5$ . Wyniki badań doświadczalnych: osobno  $k_{\text{eksp}}$  i  $E_{\text{eksp}}$  dla  $f_{\text{inc}} = 0.74$  oszacowano stosując funkcję dopasowania wielomianem trzeciego stopnia danych  $(f_{\text{inc}}, k_{\text{eksp}})$  i  $(f_{\text{inc}}, E_{\text{eksp}})$  z eksperymentów z [128]. Procedura doboru wartości parametrów interfejsu  $(\alpha, \eta, \mu)$  oraz  $P_\lambda$  z Eq.4.10 w podejściu MRP była następująca:

1. dobór wartości  $\alpha$  oraz  $(\eta, \mu)$  tak, aby oszacowane efektywne parametry materiałowe schematem SC były równe aproksymowanym wynikom badań doświadczalnych  $\bar{k}_{SC} = k_{\text{eksp}}$  i  $\bar{E}_{SC} = E_{\text{eksp}}$  dla  $f_{\text{inc}} = \sqrt{2}\pi/6$  (maksymalny udział objętościowy jednakowych sferycznych wtrąceń).
2. dobór wartości stałej  $P_\lambda$  występującej w funkcji  $\mathcal{F}_\lambda(f_{\text{inc}})$  (Eq.4.10) na podstawie wyników badań eksperymentalnych współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu  $(f_{\text{inc}}, k_{\text{eksp}})$ .

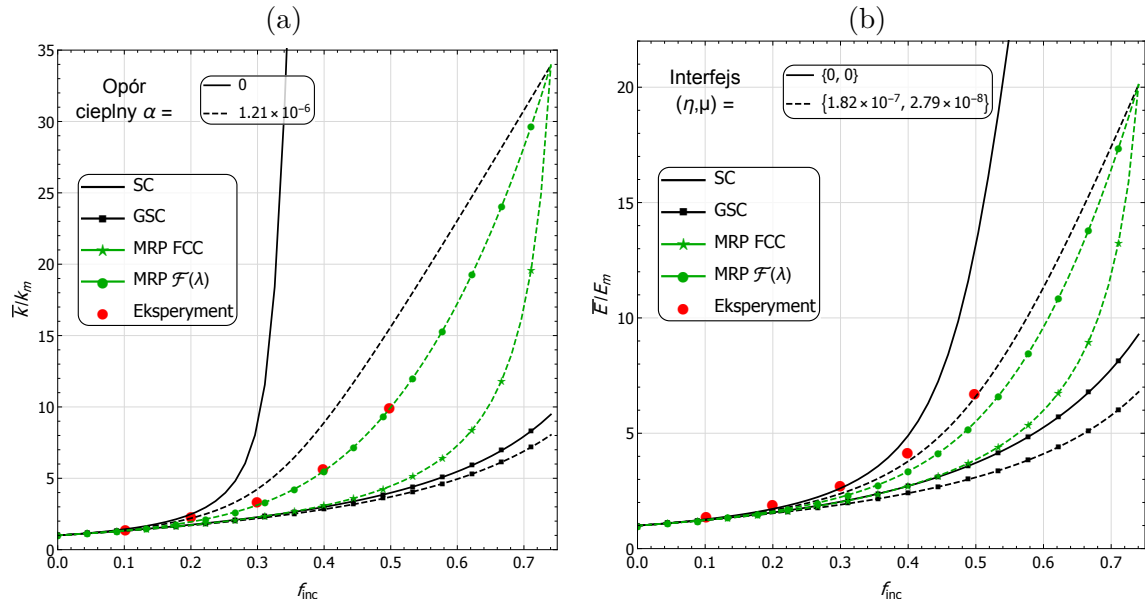
Na rysunkach 4.19 i 4.20 zaprezentowano wyniki dopasowania modelu MRP do wyników badań doświadczalnych dwóch różnych kompozytów według tej procedury.



Rysunek 4.19: Efektywny (a) współczynnik przewodzenia ciepła (b) moduł Younga kompozytu o osnowie epoksydowej zbrojonej gliną vs. udział objętościowy wtrąceń  $f_{\text{inc}}$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. Eksperyment – badania doświadczalne z publikacji Wong i in. [128]. Parametry materiałowe kompozytu: osnowa – żywica epoksydowa, zbrojenie – glina, wypisano w Tab.4.2. Wyniki oznaczone przerywaną linią dotyczą modeli mikromechanicznych z: (a) oporem cieplnym Kapitzy  $\alpha$  (podrozdział 2.2.2), (b) podatnym interfejsem  $(\eta, \mu)$  (podrozdział 2.3.2) na granicy faz. W modelu MRP upakowanie  $\lambda(f_{\text{inc}})$  wtrąceń przyjęto: układ regularny ściennie centrowany FCC funkcja  $\lambda(f_{\text{inc}})$  wg. Eq.4.9, lub  $\lambda(f_{\text{inc}}) = \mathcal{F}_\lambda(f_{\text{inc}})$  wg. Eq.4.10.

Rezultaty badań eksperymentalnych na Rys.4.19 kompozytu o osnowie epoksydowej zbrojonej gliną znajdują się między wynikami modelu SC a GSC zarówno przy założeniu perfekcyjnego  $(\alpha, \eta, \mu) = 0$  jak i niedoskonałego połączenia faz  $(\alpha, \eta, \mu) \neq 0$  (odpowiednio linie ciągłe i przerywane). Dla przyjętych parametrów interfazy  $(\alpha, \eta, \mu) \neq 0$ , podanych na Rys.4.19, rezultaty

badania doświadczalnych znajdują się poniżej schematu SC z niedoskonałym interfejsem. Funkcja upakowania  $\mathcal{F}_\lambda(f_{\text{inc}})$  wg Eq.4.10 w podejściu MRP, dopasowana dla efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu (Rys.4.19.a), zastosowana w oszacowaniu efektywnego modułu Younga (Rys.4.19.b) daje dobrą zgodność pomiędzy rezultatami modelu MRP i badań eksperymentalnych z [128] (na Rys.4.19 odpowiednio przerywana zielona linia z kółkami i czerwone punkty). Oszacowania MRP parametru upakowania dla regularnego układu FCC są zaś znacznie poniżej wyników badań doświadczalnych.



Rysunek 4.20: Efektywny (a) współczynnik przewodzenia ciepła (b) moduł Younga kompozytu o osnowie epoksydowej zbrojonej SCAN vs. udział objętościowy wtrąceń  $f_{\text{inc}}$ . Modele mikromechaniczne: SC – schemat samozgodny, GSC – uogólniony schemat samozgodny, MRP – model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu. Eksperyment – badania doświadczalne z publikacji Wong i in. [128]. Parametry materiałowe kompozytu: osnowa – żywica epoksydowa, zbrojenie – SCAN, wypisano w Tab.4.2. Wyniki oznaczone przerywaną linią dotyczą modeli mikromechanicznych z: (a) oporem cieplnym Kapitzy  $\alpha$  (podrozdział 2.2.2), (b) podatnym interfejsem  $(\eta, \mu)$  (podrozdział 2.3.2) na granicy faz. W modelu MRP upakowanie  $\lambda(f_{\text{inc}})$  wtrąceń przyjęto: układ regularny ściennie centrowany FCC funkcja  $\lambda(f_{\text{inc}})$  wg. Eq.4.9, lub  $\lambda(f_{\text{inc}}) = \mathcal{F}_\lambda(f_{\text{inc}})$  wg. Eq.4.10.

Podobnie jak poprzednio, na Rys.4.20 dotyczącym kompozytu o osnowie epoksydowej zbrojonej SCAN zaprezentowano wyniki badań eksperymentalnych (czerwone punkty) oraz oszacowania modeli mikromechanicznych: SC, GSC i MRP. Współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu z publikacji [128] znajduje się między wynikami SC a GSC zarówno z perfekcyjnym  $(\alpha, \eta, \mu) = 0$  jak i niedoskonałym połączeniem faz  $(\alpha, \eta, \mu) \neq 0$  (Rys.4.20.a), natomiast moduł Younga kompozytu (Rys.4.20.b) dla udziałów objętości fazy wtrąceń  $f_{\text{inc}}$  poniżej 30% jest

nieznacznie sztywniejszy niż oszacowanie SC dla doskonałego połączenia faz. Dla  $f_{inc}$  powyżej około 35% na Rys.4.20.b  $E_{eksp} \approx \bar{E}_{SC}$  z dodatnim interfejsem  $(\eta, \mu) \neq 0$  na granicy faz. Przyjęta funkcja upakowania  $\mathcal{F}_\lambda(f_{inc})$  w postaci Eq.4.10 w podejściu MRP dopasowana dla efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła kompozytu (Rys.4.19.a) zastosowana w oszacowaniu efektywnego modułu Younga (Rys.4.19.b) daje niższy oszacowany moduł Younga niż otrzymany w badaniach doświadczalnych.

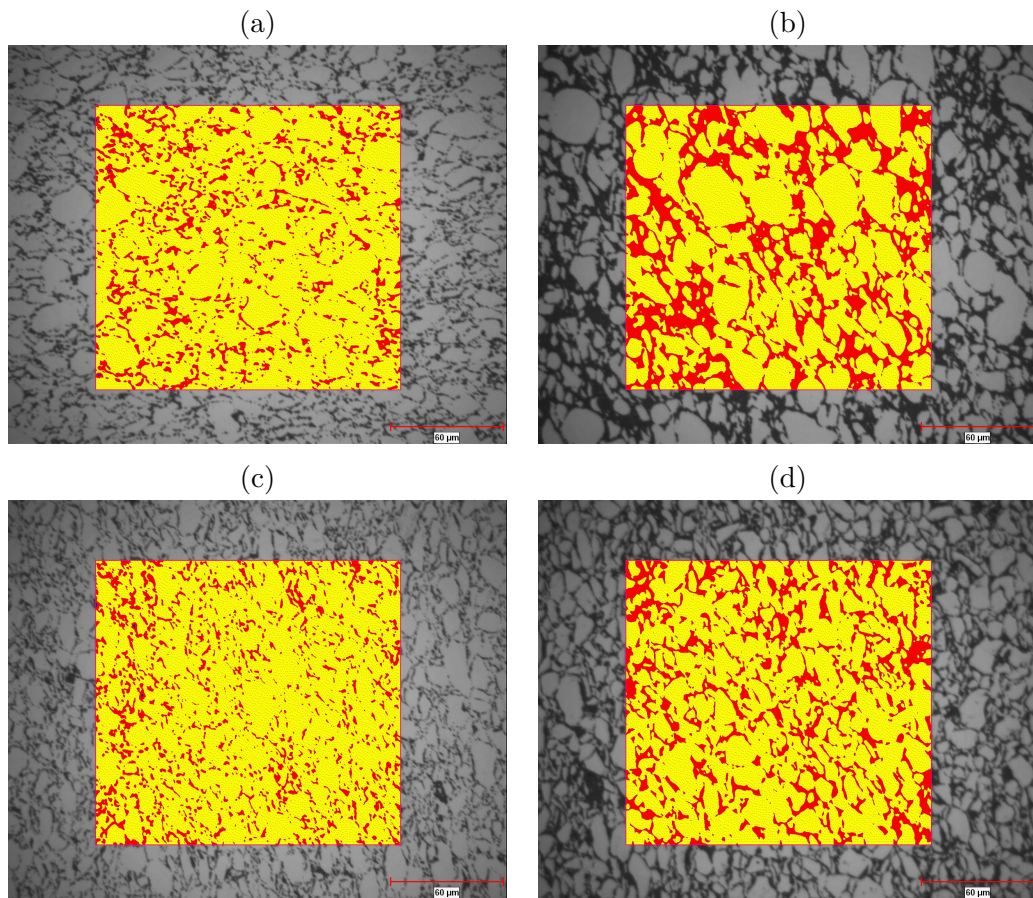
**Charakteryzacja mikrostruktury i wybranych właściwości termomechanicznych materiałów kompozytowych na bazie NiAl.** W ramach projektu Narodowego Centrum Nauki OPUS 2013/09/B/ST8/ 03320 wykonano badania eksperymentalne spiekanych materiałów na bazie związku międzymetalicznego NiAl, który domieszkowano tlenkiem glinu  $Al_2O_3$  o dwóch granulacjach (mikro- i nanoproszek) [134, 135]. Kompozyty NiAl- $Al_2O_3$  powstały w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki w Pracowni Zaawansowanych Materiałów Kompozytowych [135]. Próbki materiału o wymiarach: średnica 46 mm, wysokość około 10 mm, zostały wytworzone techniką spiekania pod ciśnieniem przy wykorzystaniu prasy do spiekania. W procesie wytwarzania założono składy próbek o następujących udziałach objętościowych faz [135]:

- 100% NiAl,
- 85% NiAl + 15%  $Al_2O_3$  (mikro),
- 85% NiAl + 15%  $Al_2O_3$  (nano),
- 70% NiAl + 30%  $Al_2O_3$  (mikro),
- 70% NiAl + 30%  $Al_2O_3$  (nano).

Charakteryzację mikrostruktury oraz badania wybranych właściwości wytworzonych materiałów przeprowadzono w Instytucie Technologii Materiałów Elektronicznych [134]. Za pomocą metody hydrostatycznej zbadano gęstość materiałów kompozytowych. Pomiarów wykonano na trzech różnych próbkach z tej samej serii. Każda kompozycja próbek uzyskała gęstość zmierzoną równą gęstości teoretycznej. Na podstawie wyników metody hydrostatycznej stwierdzono, że gęstość względna kompozytów NiAl- $Al_2O_3$  wynosi 100% oraz nie stwierdzono obecności porów.

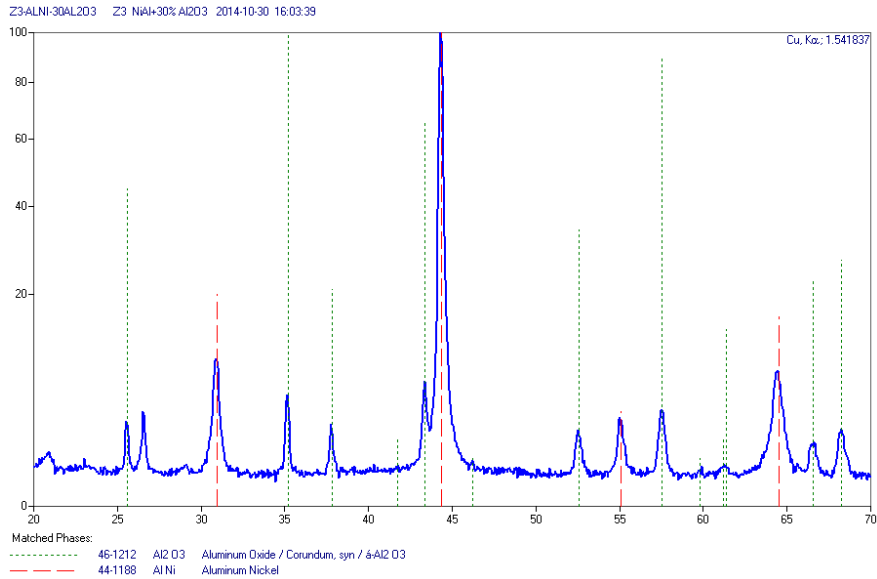
Uzyskane wyniki gęstości potwierdzono poprzez telewizyjną analizę obrazu. W zakresie powiększeń możliwych do zastosowania badaną techniką (do 500 razy) nie zauważono występowania pustek. Na podstawie uzyskanych obrazów binarnych mikrostruktur próbek przeanalizowano rozkład fazy wzmacniającej  $Al_2O_3$  w materiale kompozytowym (Rys.4.21). Wykonano 10 przekrojów każdego materiału kompozytowego i oszacowano średnią zawartość fazy ceramicznej korzystając z telewizyjnej analizy obrazu. Maksymalne wahanie pomiędzy pomiarami różnych przekrojów wynosi 5 punktów procentowych dla próbek o zawartości 30% nanoproszku ceramiki, natomiast w pozostałych przypadkach rozbieżność udziału objętościowego jest mniejsza niż 1.5

punktu procentowego. Wyniki telewizyjnej analizy obrazu wskazują na równomierne rozmieszczenie fazy ceramiki w strukturze kompozytu.

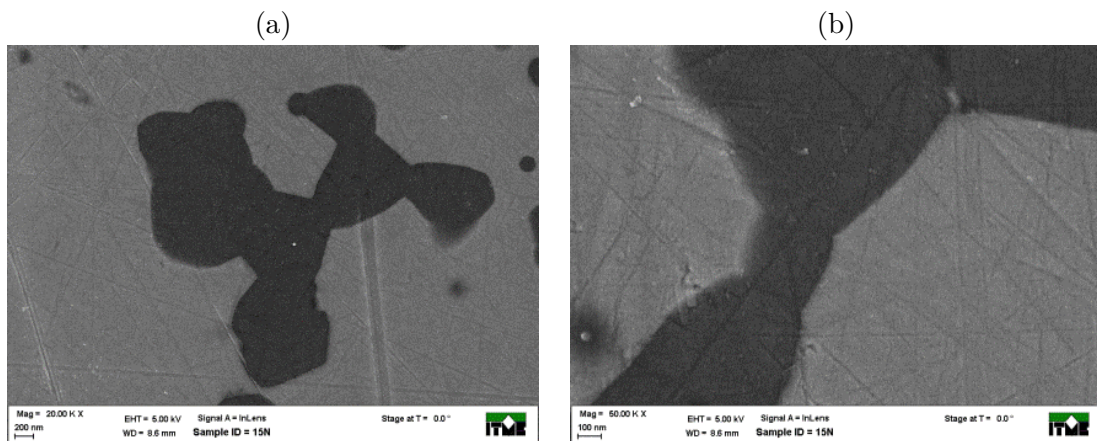


Rysunek 4.21: Przykładowe obrazy struktur kompozytowych NiAl- $\text{Al}_2\text{O}_3$  [134] z wyodrębnieniem poszczególnych składników kompozytu: kolor żółty - NiAl, kolor czerwony –  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Udział objętościowy fazy zbrojenia  $\text{Al}_2\text{O}_3$ : (a) i (c) 15%, (b) i (d) 30%. Granulacja  $\text{Al}_2\text{O}_3$ : (a) i (b) mikroproszek, (c) i (d) nanoproczek.

Przeprowadzono analizę fazową składu materiałów kompozytowych z użyciem wysokorozdzielczego dyfraktometru rentgenowskiego. Na Rys.4.22 zaprezentowano wyniki badań dyfraktometrem rentgenowskim dla kompozytu o osnowie NiAl zbrojonego 30% fazą wzmocnienia  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , na którym kolorem zielonym i czerwonym zaznaczono piki kolejno dla fazy ceramiki i fazy międzymetalicznej NiAl. Podobne rezultaty otrzymano dla pozostałych składników materiału kompozytowego. W przypadku kompozytów NiAl- $\text{Al}_2\text{O}_3$  stwierdzono występowanie jedynie pików materiałów składowych kompozytu tj. NiAl i  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , bez obecności żadnych dodatkowych faz. Na podstawie badań dyfraktometrem rentgenowskim nie stwierdza się występowania międzyfazy.



Rysunek 4.22: Rezultaty badań dyfraktogramem rentgenowskim [134] kompozytu o osnowie NiAl zbrojonego 30% fazą wzmocnienia Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Występowanie pików materiałów składowych kompozytu: kolor czerwony - NiAl, kolor zielony - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.



Rysunek 4.23: Obrazy SEM połączenia na granicy metal-ceramika dla kompozytu NiAl-15% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoproszek [134]. Kolor ciemnoszary - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. (a) Cząstka ceramiki, (b) powiększenie granicy między fazami.

Na podstawie badań z użyciem mikroskopii elektronowej nie stwierdzono wyraźnych różnic w strukturze kompozytów w zależności od granulacji mikro- lub nanoproszku materiału wzmocnienia. Nie stwierdzono występowania dodatkowych faz na granicy rozdziálu metal-ceramika (Rys.4.23). Na podstawie prac zespołów odpowiedzialnych za wytwarzanie i charakteryzację analizowanego materiału [136, 137, 138] można stwierdzić, że połączenie składników kompozytu

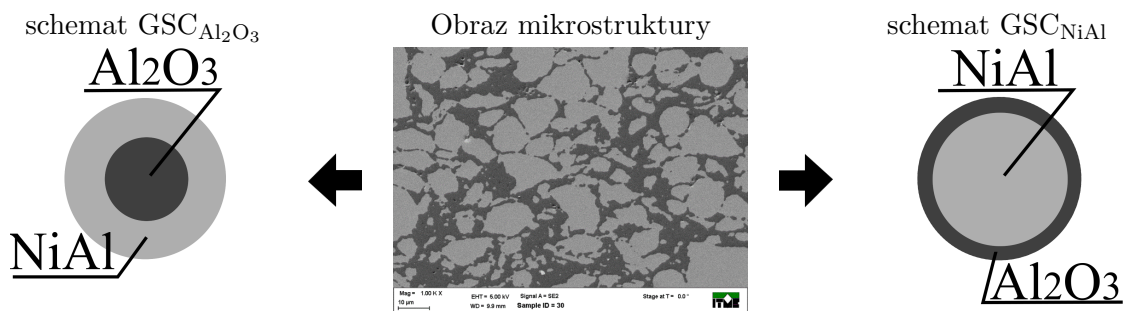
ma raczej charakter adhezyjny. Przykładowe zdjęcia granicy metal-ceramika przedstawiono na rysunku 4.23.

W modelowaniu mikromechanicznym przyjęto następujące parametry materiałowe:

- NiAl – na podstawie wykonanych badań doświadczalnych [134]: moduł sprężystości  $E_{\text{NiAl}} = 186$  [GPa] i współczynnik przewodzenia ciepła  $k_{\text{NiAl}} = 55.26$  [W/mK], z literatury [137, 139]: współczynnik Poissona  $\nu_{\text{NiAl}} = 0.31$ ,
- $\text{Al}_2\text{O}_3$  – ponieważ nie wykonano badań doświadczalnych dla czystego spieku  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , przyjęto parametry : moduł sprężystości  $E_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 345$  [GPa], współczynnik Poissona  $\nu_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 0.24$  i współczynnik przewodzenia ciepła  $k_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 35$  [W/mK], które są jednakowe jak podane na stronie firmy Molecular Technology GmbH<sup>1</sup>. Na podstawie przyjętych danych moduł ścinania wynosi  $G_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 139$  [GPa]. Przyjęte parametry materiałowe  $\text{Al}_2\text{O}_3$  są w większości zgodne z literaturą m.in.[136, 137, 138, 139].

Na podstawie obrazów mikrostruktury kompozytu NiAl- $\text{Al}_2\text{O}_3$  (Rys.4.24) zaobserwowano, że ziarna ceramiki zarówno nano jak i mikroproszku tworzą po procesie spiekania ciągle obszary fazy ceramicznej wielu połączonych ze sobą ziaren. W materiale kompozytowym nie ma podziału na fazę rozproszoną i fazę ciągłą. Dla takiej mikrostruktury w uogólnionym schemacie samozgodnym można założyć rozkład faz na dwa sposoby:

- oznaczenie  $\text{GSC}_{\text{Al}_2\text{O}_3}$  na Rys.4.24 - jako fazę rozproszoną przyjmujemy  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , natomiast jako fazę ciągłą zakładamy NiAl,
- oznaczenie  $\text{GSC}_{\text{NiAl}}$  na Rys.4.24 - jako fazę rozproszoną przyjmujemy NiAl, natomiast jako fazę ciągłą zakładamy  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .



Rysunek 4.24: Obraz mikrostruktury kompozytu NiAl-30% $\text{Al}_2\text{O}_3$  mikroproszek [134] oraz reprezentacja uogólnionego schematu samozgodnego w wariantach:  $\text{GSC}_{\text{Al}_2\text{O}_3}$  - faza rozproszona  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{GSC}_{\text{NiAl}}$  - faza rozproszona NiAl.

Wyniki badań doświadczalnych [134] oraz modelowania mikromechanicznego zebrano w tabeli 4.3 i przedstawiono na wykresach Rys.4.25. W badaniach mikrostrukturalnych materiału

<sup>1</sup>[www.mt-berlin.com/frames\\_cryst/descriptions/sapphire.htm](http://www.mt-berlin.com/frames_cryst/descriptions/sapphire.htm)

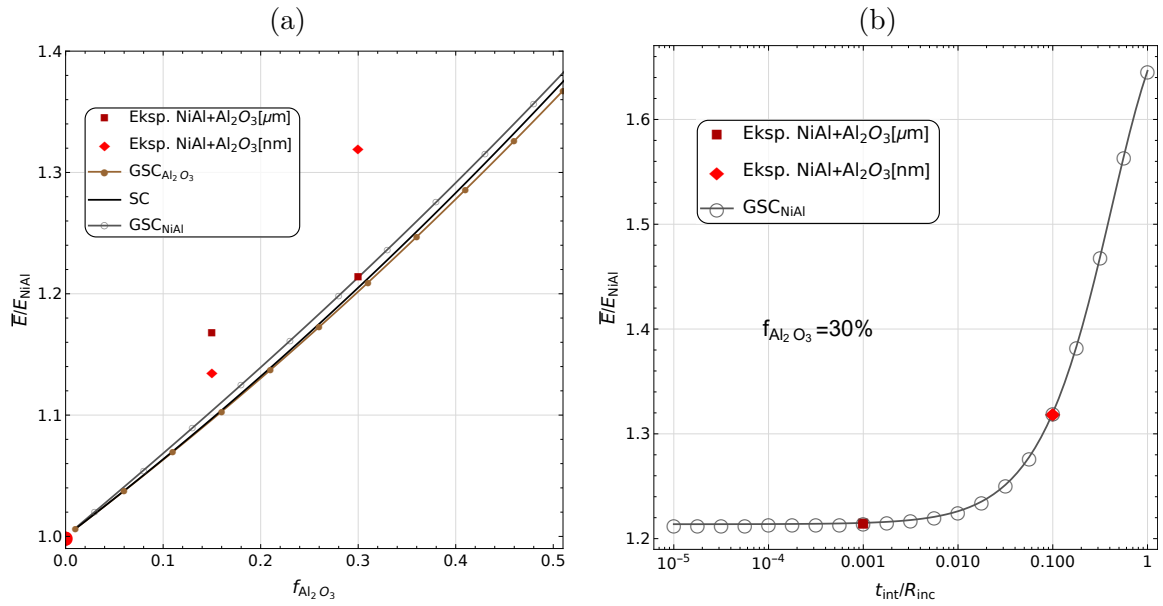
kompozytowego nie zauważono obecności dodatkowej fazy na granicy połączenia ceramika-metal (Rys.4.23), dlatego w Tab.4.3 przedstawiono wyniki oszacowań modelami mikromechanicznymi kompozytu dwufazowego NiAl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> z parametrami materiałowymi faz:  $E_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 345$  [GPa],  $\nu_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 0.24$  i  $k_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 35$  [W/mK] oraz  $E_{\text{NiAl}} = 186$  [GPa],  $\nu_{\text{NiAl}} = 0.31$  i  $k_{\text{NiAl}} = 55.26$  [W/mK].

Tabela 4.3: Efektywny moduł Younga  $\bar{E}$  [GPa] oraz współczynnik przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  [W/mK] kompozytów NiAl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Udział objętościowy fazy zbrojenia Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: 15% lub 30%. Granulacja Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: mikro- lub nanoproszek. Wyniki badań doświadczalnych: średnia arytmetyczna z wykonanych N pomiarów (N=9 dla większości przypadków) oraz odchylenie standardowe. Wyniki uogólnionego schematu samozgodnego: GSC<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> - faza rozproszona Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, GSC<sub>NiAl</sub> - faza rozproszona NiAl (Rys.4.24).

$f_{\text{inc}}$			$\bar{E}$ [GPa]	$\bar{k}$ [W/mK]
15%	Badania doświadczalne	Nanoproszek	$211.2 \pm 6.9$	$55.1 \pm 0.8$
		Mikroproszek	$217.2 \pm 5.9$	$55.3 \pm 2.5$
15%	Modele mikromechaniczne	GSC <sub>NiAl</sub>	205.26	51.74
		SC	204.07	51.85
		GSC <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	203.89	51.87
30%	Badania doświadczalne	Nanoproszek	$245.5 \pm 5.4$	$43.0 \pm 1.3$
		Mikroproszek	$225.8 \pm 4.1$	$50.1 \pm 1.1$
30%	Modele mikromechaniczne	GSC <sub>NiAl</sub>	225.71	48.41
		SC	224.14	48.56
		GSC <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	223.54	48.61

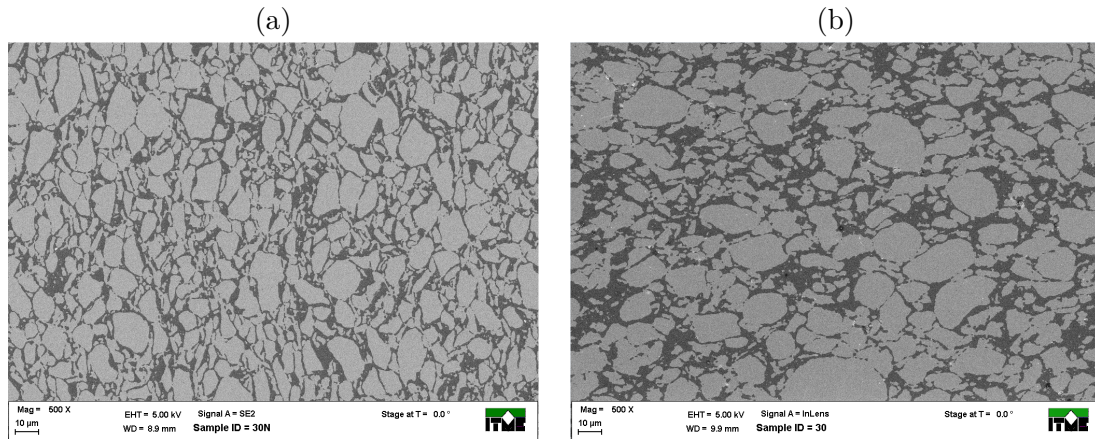
Zgodnie z przewidywaniami wraz ze wzrostem udziału objętościowego ceramiki odnotowano w badaniach doświadczalnych [134] oraz symulacjach modeli mikromechanicznych wzrost modułu sprężystości  $\bar{E}$  [GPa] oraz spadek współczynnika przewodzenia ciepła  $\bar{k}$  [W/mK] materiału kompozytowego (Tab.4.3 i Rys.4.25). Dla udziału objętościowego wtrąceń  $f_{\text{inc}} = 15\%$  wyniki badań doświadczalnych  $\bar{E}$  i  $\bar{k}$  obu granulacji Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> są na zbliżonym poziomie [134]. Oszacowania  $\bar{E}$  i  $\bar{k}$  modelami mikromechanicznymi z Tab.4.3 dla różnych schematów : GSC<sub>NiAl</sub>, SC i GSC<sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>, mają zbliżone wartości, szczególnie efektywny współczynnik przewodzenia ciepła kompozytu jest prawie jednakowy, dlatego nie zaprezentowano na wykresie oszacowania  $\bar{k}$  modelami mikromechanicznymi, a jedynie moduł sprężystości  $\bar{E}$  kompozytu w stosunku do  $E_{\text{NiAl}}$  (Rys.4.25).





Rysunek 4.25: (a) Efektywny moduł sprężystości  $\bar{E}$  materiału kompozytowego NiAl- $Al_2O_3$  vs. udział objętościowy fazy ceramiki  $Al_2O_3$ . (b) Efektywny moduł sprężystości  $\bar{E}$  materiału kompozytowego NiAl-30% $Al_2O_3$  vs. parametr rozmiaru fazy  $Al_2O_3$  (Rys.4.27). Modele mikromechaniczne: SC - schemat samozgodny, GSC - uogólniony schemat samozgodny:  $GSC_{Al_2O_3}$  jako fazę rozproszoną przyjmujemy  $Al_2O_3$ ,  $GSC_{NiAl}$  jako fazę rozproszoną przyjmujemy NiAl. Badania doświadczalne: czerwone punkty. Granulacja proszku  $Al_2O_3$ : mikro lub nano. (a) Oszacowania kompozytu dwufazowego, (b) trójskalowe podejście schematem GSC Rys.4.27 z  $t_{int} = 1$  [nm] i  $E_{int} = 868$  [GPa].

Na Rys.4.25.a pokazano efektywny moduł sprężystości oszacowany modelami mikromechanicznymi dwufazowego kompozytu w funkcji udziału objętościowego ceramiki. Zaprezentowane na Rys.4.25.a modele mikromechaniczne nie uwzględniają wpływu wielkości granulacji faz. Na podstawie oszacowań schematem GSC parametrów  $\bar{E}$  i  $\bar{k}$  (Tab.4.3) można wnioskować, że wariant  $GSC_{NiAl}$  z Rys.4.24, w którym fazą rozproszoną jest faza NiAl oraz fazą ciągłą  $Al_2O_3$ , daje rezultaty najbliższe wynikom badań eksperymentalnych, co dla  $\bar{E}$  zaprezentowano na wykresie Rys.4.25.a. Wariant  $GSC_{NiAl}$  ma również uzasadnienie w uzyskanych eksperymentalnie obrazach mikrostruktury, np. Rys.4.26.

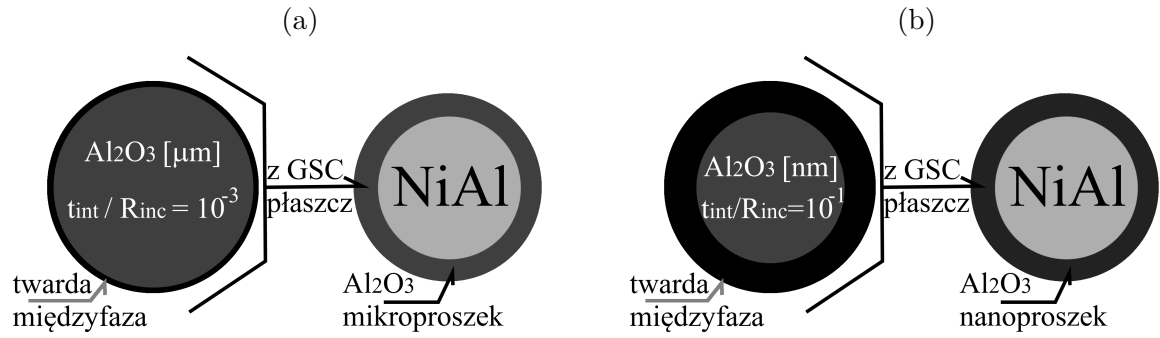


Rysunek 4.26: Obrazy SEM mikrostruktury kompozytu NiAl-30%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, (a) nano- (b) mikroproszek Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [134].

Wraz ze wzrostem udziału objętościowego fazy ceramiki do 30% rozbieżności wartości parametrów  $\bar{E}$  i  $\bar{k}$  między mikro- i nanoproszkiem rosną znacząco [134]. Dla  $f_{inc} = 30\%$  moduł sprężystości kompozytu NiAl zbrojonego nanoproszkiem Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> jest większy w porównaniu do granulacji mikro ceramiki, podczas gdy dla współczynnika przewodzenia ciepła sytuacja jest odwrotna (Tab.4.3).

Porównując przykładowe mikrostruktury Rys.4.26 z  $f_{inc} = 30\%$  można stwierdzić, że w przypadku granulacji nano Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> faza ceramiki jest bardziej rozproszona (Rys.4.26.a) niż dla granulacji mikro (Rys.4.26.b). Na podstawie rezultatów eksperymentu wytrzymałości na zginanie kompozytu NiAl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, opublikowanych w raporcie [134], wysnuto wniosek, że ceramika przy udziale objętościowym 30% tworzy w strukturze kompozytu ciągłą sieć, przez którą przebiega łatwa droga pęknięcia. Można przypuszczać, że równomierne rozłożenie fazy ceramiki w kompozycie z nanoproszkiem ceramiki jest powodem wyższej sprężystości oraz niższego współczynnika przewodzenia ciepła ceramiki korundowej. Alternatywnie można założyć, że właściwości Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w materiale kompozytowym NiAl-30%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> zależą od granulacji ceramiki – takie podejście zostało omówione poniżej przy wykorzystaniu schematu GSC w wariacie GSC<sub>NiAl</sub> w dwóch krokach (Rys.4.27).

Aby w modelu mikromechanicznym uwzględnić różnicę w wynikach eksperymentalnych dotyczących modułu sprężystości  $\bar{E}$  dla  $f_{inc} = 30\%$  kompozytu NiAl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w zależności od granulacji ceramiki, przyjęto trójskalowy schemat GSC<sub>NiAl</sub> (Rys.4.27). W pierwszej skali w fazie Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> zakłada się obecność twardej międzyfazy o parametrach: grubość osnowy  $t_{int} = 1$  [nm] oraz  $E_{int} = 868$  [GPa]. Następnie korzystając ze schematu GSC oszacowuje się efektywne parametry materiałowe Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+międzyfaza, które następnie w skali pośredniej w modelu GSC<sub>NiAl</sub> opisują właściwości płaszczka. W rezultacie w zależności od stosunku  $t_{int}/R_{inc}$ , który jest kolejno równy  $10^{-3}$  (Rys.4.27.a) oraz  $10^{-1}$  (Rys.4.27.b) dla granulacji mikro i nano fazy ceramiki, wpływ międzyfazy na makroskopową odpowiedź kompozytu będzie różny.



Rysunek 4.27: Reprezentacja trójskalowego modelu GSC. Założono obecność twardej międzyfazy  $E_{\text{int}} = 868$  [GPa] o grubości  $t_{\text{int}} = 1$  [nm] w fazie Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, modyfikując schemat GSC<sub>NiAl</sub> z Rys.4.24. Granulacja (a) mikro i (b) nano fazy ceramiki.

Po wprowadzeniu twardej międzyfazy dla Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w [ $\mu\text{m}$ ] wartość  $\bar{E}$  wzrosła z 225.71 [GPa] (Tab.4.3) do 226.31 [GPa] (Tab.4.4), dlatego wpływ międzyfazy na efektywny moduł Younga kompozytu NiAl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> jest pomijalny dla granulacji mikro ceramiki. Natomiast efektywny moduł sprężystości materiału kompozytowego NiAl-30%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oszacowany trójskalowym schematem GSC<sub>NiAl</sub> dla granulacji 10 [nm] fazy Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> jest znacznie wyższy po wprowadzeniu twardej międzyfazy o grubości  $t_{\text{int}} = 1$  [nm], tj. oszacowano wzrost wartości  $\bar{E}$  do poziomu 246.40 [GPa] (Tab.4.4).

Tabela 4.4: Moduł Younga  $E$  [GPa] kompozytu NiAl-30%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Granulacja Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: mikroproszek lub nanoproszek. Wyniki badań doświadczalnych: średnia arytmetyczna z 9 pomiarów oraz odchylenie standardowe. Wyniki uogólnionego schematu samozgodnego GSC<sub>NiAl</sub> - faza rozproszona NiAl (Rys.4.24) w podejściu trójskalowym (Rys.4.27), w którym wartość  $E_{\text{Al}_2\text{O}_3}$  wyliczono uwzględniając założoną międzyfazę:  $t_{\text{int}} = 1$  [nm] i  $E_{\text{int}} = 868$  [GPa] oraz granulację  $R_{\text{inc}}$  proszku Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

$f_{\text{inc}}$			$\bar{E}$ [GPa]	$t_{\text{int}}/R_{\text{inc}}$
30%	Badania	Nanoproszek	$245.5 \pm 5.4$	-
	doświadczalne	Mikroproszek	$225.8 \pm 4.1$	-
30%	Schemat	Nanoproszek	246.40	$10^{-1}$
	GSC <sub>NiAl</sub>	Mikroproszek	226.31	$10^{-3}$

Wpływ międzyfazy na efektywny moduł sprężystości materiału kompozytowego w funkcji parametru wielkości wtrąceń zaprezentowano na Rys.4.25.b. Zastosowanie trójskalowego podejścia pozwala oszacować wpływ wielkości granulacji proszku ceramiki na efektywny moduł sprężystości ceramiki korundowej. Dla dobranych właściwości mechanicznych międzyfazy uzyskano zgodność z wynikami badań doświadczalnych dla  $f_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 30\%$ . Analogiczną procedurę można przyjąć do wyznaczenia efektywnego współczynnika przewodzenia ciepła materiału kompozytowego. Niemniej przyjęte trójskalowe podejście  $\text{GSC}_{\text{NiAl}}$  jest niewystarczające do jednoczesnego opisu uzyskanej eksperymentalnie odwrotnej relacji wartości modułów sprężystych dla  $f_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 15\%$  w stosunku do  $f_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 30\%$  w zależności od granulacji mikro i nano  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Jednakże oszacowania właściwości mechanicznych i termicznych otrzymane modelami mikromechanicznymi wskazują kierunek kolejnych badań doświadczalnych mających na celu zbadanie zjawisk zachodzących w materiale kompozytowym  $\text{NiAl-Al}_2\text{O}_3$ , przykładowo:

- wykonanie badań próbek o innych udziałach objętościowych  $f_{\text{Al}_2\text{O}_3}$  np. 10% oraz 20%, aby określić trend relacji efektywnych parametrów materiałowych w zależności od granulacji proszku ceramiki,
- wykonanie badań próbek spieku czystego  $\text{Al}_2\text{O}_3$  o różnej granulacji i zbadanie ich parametrów materiałowych,
- zbadanie właściwości mechanicznych oraz współczynnika przewodzenia ciepła cząstki fazy  $\text{Al}_2\text{O}_3$  w kompozycie  $\text{NiAl-30\%Al}_2\text{O}_3$ , aby zweryfikować podejście trójskalowe  $\text{GSC}_{\text{NiAl}}$  przyjęte w niniejszej rozprawie.

## Rozdział 5

# Podsumowanie i wnioski

Przedstawiony w pracy doktorskiej model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu (MRP) pozwala oszacować makroskopowe właściwości materiału kompozytowego zbrojonego sferycznymi cząstkami. Model MRP jest efektywny obliczeniowo i pozwala poprawnie opisać wpływ rozmiaru i przestrzennego upakowania wtrąceń oraz wpływ granicy międzyfazowej na efektywne parametry materiałowe kompozytu. Efekt upakowania wtrąceń jest opisany poprzez grubość powłoki  $\bar{\lambda}/2$  w jednym ze wzorców MRP. Grubość powłoki jest równa połowie średniej minimalnej odległości między zewnętrznymi powierzchniami wtrąceń w reprezentatywnym elemencie objętości. W celu uwzględnienia efektu rozmiaru wtrąceń w modelu (N+1)-GSC wykorzystano w rozprawie dwa podejścia: zaburzenie ciągłości lokalnych pól mechanicznych (podatny interfejs) lub termicznych (opór cieplny) na granicy faz, albo wprowadzenie międzyfazy o grubości niezależnej od promienia cząstki i różnych właściwościach niż podstawowe dwie fazy kompozytu. Opracowane w pracy doktorskiej procedury posłużyły do wyznaczenia makroskopowego współczynnika przewodzenia ciepła i właściwości sprężysto-plastycznych przy pomocy zaproponowanego modelu. W celu rozszerzenia modeli mikromechanicznych średniego pola (w tym modelu MRP) na nieliniowe związki konstytutywne zastosowano przyrostową linearyzację odpowiedzi materiału w kolejnych krokach obliczeniowych.

Makroskopowe właściwości materiału niejednorodnego oszacowane danym modelem mikromechanicznym zależą w sposób oczywisty od zastosowanego schematu uśredniania. Konsekwentnie, oszacowana analitycznie, makroskopowa odpowiedź materiału kompozytowego zależy również od zgodności i prawidłowej identyfikacji opisu konstytutywnego zastosowanego na poziomie mikro (rozważanej fazy w kompozycie) oraz od pozostałych przyjętych założeń dotyczących mikrostruktury np. występowania międzyfazy. Rezultaty homogenizacji numerycznej otrzymane przy pomocy MES pozwalają jednoznacznie zadać mikrostrukturę materiału niejednorodnego oraz związki konstytutywne i tym samym ominąć trudności związane z identyfikacją właściwości materiału w skali mikro, z jakimi mamy do czynienia w przypadku analizy wyników badań eksperymentalnych. Dlatego homogenizacja numeryczna jest istotnym narzędziem do weryfikacji formułowanych modeli analitycznych. W pracy doktorskiej opracowano metodologię weryfikacji

modeli analitycznych przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej i metody elementów skończonych, przy spełnieniu wymagań dotyczących reprezentatywności mikrostruktur. Weryfikacja schematów uśredniania opracowanych w rozprawie polegała na sprawdzeniu na ile znacząca jest zaproponowana aproksymacja i jakie wprowadza różnice w stosunku do rzeczywistego (ściśłego) rozwiązania analizowanego problemu. Zestawienie rezultatów analizy homogenizacji numerycznej MES z oszacowaniami wyznaczonymi modelami mikromechanicznymi pozwoliło na sprawdzenie poprawności poszczególnych schematów przejścia mikro-makro opartych na uśrednionych polach dla poszczególnych typów materiałów i mikrostruktur. Dodatkowo walidacja modeli mikromechanicznych została przeprowadzona przy wykorzystaniu dostępnych wyników badań doświadczalnych, choć w tym przypadku napotkano na wskazane wcześniej trudności w identyfikacji mikrostruktury materiału i jego właściwości na poziomie faz kompozytu.

Wykonano analizę wpływu cech mikrostruktury materiału takich jak: upakowanie wtrąceń, rozmiar wtrąceń, parametry granicy międzyfazowej, na makroskopowe właściwości kompozytu: moduły sprężystości  $K$  i  $G$ , odpowiedź sprężysto-plastyczną oraz współczynnik przewodzenia ciepła  $k$ . Biorąc pod uwagę wyniki symulacji można w szczególności stwierdzić, że:

- Efektywne parametry materiałowe  $k$ ,  $K$  i  $G$  otrzymane techniką homogenizacji numerycznej znajdują się między oszacowaniem schematem samozgodnym a jego uogólnieniem.
- Wraz ze wzrostem udziału objętościowego wtrąceń rezultaty homogenizacji numerycznej zbliżają się do oszacowań schematem SC oddalając od wyników podejścia GSC, jest to szczególnie widoczne dla komórek jednostkowych z regularnym układem wtrąceń np. RC, BCC czy FCC. Model morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu uwzględnia wpływ udziału objętościowego wtrąceń oraz ich upakowanie na efektywne parametry materiałowe kompozytu odwzorowując zjawiska obserwowane w wynikach MES.
- Sprężysto-plastyczna odpowiedź kompozytu MMC, otrzymana przy wykorzystaniu linearizacji stycznej oraz schematu GSC, daje w większości przypadków wyższe wartości naprężeń, niż rezultaty symulacji MES.
- Wpływ parametru upakowania na właściwości efektywne wzrasta wraz ze spadkiem udziału objętościowego wtrąceń w kompozycie.
- W kompozytach zbrojonych twardymi (analogicznie dobrze przewodzącymi ciepło) wtręciami efektywne moduły sztywności sprężystej kompozytu są większe (analogicznie większa jest przewodność cieplna) dla mniejszych wartości parametru upakowania wtrąceń.
- Parametr upakowania wtrąceń wykazuje większy wpływ na wyniki symulacji numerycznych dla kompozytów o osnowie z wtręciami o lepszych parametrach materiałowych niż w przypadku osnowy z wtręciami o gorszych parametrach materiałowych.

- Parametr upakowania, jako parametr opisujący morfologię mikrostruktury, oddziałuje jednocześnie na efektywny współczynnik przewodzenia ciepła oraz moduły sprężyste kompozytu, pozwalając na analizę zależności między nimi (ang. cross-property relationship).
- Obecność międzyfazy (analogicznie jakość połączenia na granicy faz) ma decydujący wpływ na efektywne parametry materiałowe kompozytu. Gdy parametry materiałowe międzyfazy są o kilka rzędów różne od parametrów materiałowych fazy wtrąceń, to międzyfaza odgrywa kluczową rolę w kształtowaniu makroskopowych właściwości kompozytu.
- Oszacowania zaproponowanych modeli pola średniego są monotoniczne względem parametru rozmiaru wtrąceń i mogą wykazać tylko wzmocnienie albo osłabienie wraz ze wzrostem parametru rozmiaru wtrąceń.
- Wnioski dotyczące wpływu mikrostruktury kompozytu na makroskopowe właściwości materiału wyciągnięte z rezultatów dotyczących efektywnego współczynnika przewodności cieplnej  $k$  są jednakowe jak dla modułów sprężystych  $K$  i  $G$ , a symulacje numeryczne przepływu ciepła są znacznie tańsze obliczeniowo niż symulacje numeryczne właściwości mechanicznych kompozytu. Jedyne limit perkolacji schematu samozgodnego jest inny dla przewodzenia ciepła (odpowiednio  $1/3$  i  $2/3$  dla super przewodzących wtrąceń i pustek) i modułów sprężystości ( $1/2$  w obu granicznych przypadkach).
- Zastosowanie homogenizacji numerycznej wymaga określenia reprezentatywnego elementu objętości materiału. Reprezentatywność komórki symulującej fragment kompozytu zależy od liczby wtrąceń oraz od charakteru przeprowadzonej symulacji numerycznej, przykładowo 50 wtrąceń może być uznane za reprezentatywne w kontekście modułu objętościowego, natomiast jedynie w przybliżeniu reprezentatywne w aspekcie wyznaczenia efektywnego modułu ścinania.
- Oszacowania modeli mikromechanicznych pola średniego są odpowiednie dla materiałów izotropowych. W przypadku homogenizacji numerycznej właściwości mechanicznych komórek jednostkowych o pewnej symetrii (np. kubicznej) należy zastosować odpowiednią izotropizację modułów sprężystych.
- Wyniki homogenizacji numerycznej kompozytu są różne w zależności czy dana faza jest fazą ciągłą (osnowa) czy fazą rozproszoną (wtrącenia), dlatego analityczne modele powinny rozróżniać fazę ciągłą od fazy rozproszonej.
- Rozdział na fazę ciągłą i rozproszoną dla wykonanych w ramach badań w IPPT PAN kompozytów na bazie NiAl zbrojonych ceramiką korundową jest wizualnie niejednoznaczny, natomiast stosując modele mikromechaniczne można na podstawie oszacowań efektywnych parametrów materiałowych wnioskować, która z faz: NiAl czy  $Al_2O_3$  jest fazą rozproszoną, a która ciągłą.

- Niektóre wyniki badań doświadczalnych kompozytów, w założeniach dwufazowych, znajdują się poza oszacowaniami modeli mikromechanicznych, co może świadczyć o niedoskonałym połączeniu faz lub występowaniu innych faz w wytworzonych próbkach materiałów kompozytowych.

Do oryginalnych aspektów pracy można zaliczyć:

- Opracowanie modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu dla zagadnienia przepływu ciepła w kompozytach.
- Zastosowanie w modelu MRP koncepcji niedoskonałego interfejsu na granicy faz.
- Rozszerzenie modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu do zakresu sprężysto-plastycznej odpowiedzi materiału.
- Weryfikacja mikromechanicznego modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu przy wykorzystaniu homogenizacji numerycznej dla zagadnień przewodzenia ciepła oraz kompozytów sprężystych i sprężysto-plastycznych.
- Porównanie oszacowań mikromechanicznego modelu morfologicznej reprezentacji mikrostruktury kompozytu z wynikami badań doświadczalnych dostępnymi w literaturze.
- Zaproponowanie metodologii weryfikacji modeli analitycznych kompozytów o losowej mikrostrukturze za pomocą analiz numerycznych komórek jednostkowych o uproszczonej geometrii.

Na podstawie analizy wyników przedstawionych w rozprawie wyłaniają się kierunki dalszych badań:

- *Wpływ kształtu wtrąceń.* Kształt wtrącenia w podejściu mikromechanicznym inkluzja-matryca jest modelowany poprzez tensory koncentracji, które wiążą lokalne uśrednione pola mechaniczne z wielkościami makroskopowymi. Tensory koncentracji dostępne w literaturze opisują elipsoidalny kształt. Wpływ kształtu wtrąceń w mikromechanicznych modelach pola średniego można uwzględnić za pomocą numerycznych tensorów koncentracji, uzyskanych pół-analityczną metodą homogenizacji numerycznej ang. Mori-Tanaka Replacement Method [140, 141]. Numeryczne tensory koncentracji pozwolą poszerzyć katalog kształtów (np. płatek, „ziemniak”) w przewidywaniach właściwości efektywnych materiałów heterogenicznych.
- *Ewolucja uszkodzenia.* Polepszenie przewidywań odpowiedzi materiałów kompozytowych, w których następuje ewolucja uszkodzenia, w porównaniu do klasycznych modeli mikromechanicznych można uzyskać za pomocą podejścia reprezentacji morfologii mikrostruktury kompozytu za pomocą wzorców. Cechy morfologiczne mikrostruktury wpływają na mechanizm uszkodzenia materiału [24]. W pracy doktorskiej rozszerzono model MRP na



nieliniowe związki konstytutywne. Naturalnym kolejnym krokiem badań jest rozszerzenie podejścia MRP do modelowania rozwoju uszkodzenia w kompozytach. Zaproponowana linearyzacja nieliniowej sprężysto-plastycznej odpowiedzi kompozytów zostanie wykorzystana w modelowaniu ewolucji uszkodzenia.

- *Podjęcie wieloskalowe z modelem MRP.* Prezentowane w rozprawie doktorskiej podejście MRP uwzględnia wpływ upakowania bliskiego zasięgu na efektywne właściwości materiałów kompozytowych zbrojonych cząstkami. Poprzez termin "upakowanie bliskiego zasięgu" określa się geometrię kompozytu na poziomie lokalnym: promień wtrącenia i odległość do najbliższego sąsiadującego wtrącenia. Wpływ klastrów na efektywne parametry materiałowe kompozytu był celem wielu prac badawczych, m.in. [36, 67]. Aby uwzględnić klastry wtrąceń w modelu MRP wprowadza się parametr upakowania dalekiego zasięgu. Poprzez termin "upakowanie dalekiego zasięgu" określa się geometrię kompozytu na poziomie meso, czyli położenie klastrów w kompozycie oraz ich rozmiary. Podjęcie trójskalowe, zawierające kolejno upakowanie bliskiego i dalekiego zasięgu, jest kluczowe do poprawnego opisu ewolucji uszkodzenia w kompozytach.

# Bibliografia

- [1] S. Nemat-Nasser, M. Hori, *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*, 2nd Edition, North Holland 1999, (1998).
- [2] K. Kowalczyk-Gajewska, *Micromechanical modelling of metals and alloys of high specific strength*, IPPT Reports on Fundamental Technological Research, (2011).
- [3] D. T. Fullwood, S. R. Niezgodą, B. L. Adams, S. R. Kalidindi, *Microstructure sensitive design for performance optimization*, *Progress in Materials Science*, 55 (2010) 477-562.
- [4] D. L. McDowell, *Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials*, *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 62 (2008) 67-123.
- [5] T. Zohdi, P. Wriggers, *An Introduction to Computational Micromechanics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2005).
- [6] M. Nitka, J. Tejchman, *A three-dimensional meso-scale approach to concrete fracture based on combined DEM with X-ray  $\mu$ CT images*, *Cement and Concrete Research*, 107 (2018) 11-29.
- [7] Ł. Skarżyński, M. Nitka, J. Tejchman, *Modelling of concrete fracture at aggregate level using FEM and DEM based on X-ray  $\mu$ CT images of internal structure*, *Engineering Fracture Mechanics* 147 (2015) 13–35.
- [8] T. Wejrzanowski, W. Sychalski, K. Różniatowski, K. Kurzydłowski, *Image Based Analysis of Complex Microstructures of Engineering Materials*, *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 18 (2008) 33–39.
- [9] D. Łydźba, A. Różański, D. Stefaniuk, *Equivalent microstructure problem: Mathematical formulation and numerical solution*, *International Journal of Engineering Science*, 123 (2018) 20–35.
- [10] J. Ptaszny, G. Działkiewicz, P. Fedelinski, *Boundary Element Method Modelling Of Nanocomposites*, *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 12 (2014) 33-43.

- [11] M. Ostoja-Starzewski, Material spatial randomness: From statistical to representative volume element, *Probabilistic Engineering Mechanics*, 21 (2006) 112-132.
- [12] M. F. Ashby, Multi-objective optimization in material design and selection, *Acta materialia*, 48 (2000) 359–369.
- [13] M. Kursa, K. Kowalczyk-Gajewska, H. Petryk, Multi-objective optimization of thermo-mechanical properties of metal-ceramic composites, *Composites: Part B-Engineering*, 60 (2014) 586-596.
- [14] L. Brassart, Homogenization of elasto-(visco) plastic composites: history-dependent incremental and variational approaches, Ph. D. thesis, Universite Catholique de Louvain, Louvain-La-Neuve, Belgium, (2011).
- [15] F. Feyel, J.-L. Chaboche, FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 183 (2000) 309–330.
- [16] M. Serafin, W. Cecot, Numerical Aspects Of Computational Homogenization, *Computer Methods In Materials Science*, 13 (2013) 213 – 218.
- [17] J. D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 241 (1957) 376–396.
- [18] E. Herve, A. Zaoui, n-layered inclusion-based micromechanical modelling, *International Journal of Engineering Science*, 31 (1993) 1–10.
- [19] M. Lefik, D.P.Boso, B.A.Schrefler, Generalized self-consistent homogenization using the Finite Element Method, *ZAMM Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 89 (2009) 306-319.
- [20] R. Christensen, Effective properties for single size, rigid spherical inclusions in an elastic matrix, *Composites Part B: Engineering*, 35 (2004) 475–482.
- [21] R. Christensen, A critical evaluation for a class of micromechanics models, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38 (1990) 379–404.
- [22] L. S. Toth, C. Gu, Ultrafine-grain metals by severe plastic deformation, *Materials Characterization*, 92 (2014) 1–14.
- [23] J. Cho, M. Joshi, C. Sun, Effect of inclusion size on mechanical properties of polymeric composites with micro and nano particles, *Journal of Computer Science and Technology*, 66 (2006) 1941–1952.

- [24] D. M. Jarzabek, M. Chmielewski, J. Dulnik, A. Strojny-Nędza, The Influence of the Particle Size on the Adhesion Between Ceramic Particles and Metal Matrix in MMC Composites, *Journal of Materials Engineering and Performance*, 25 (2016) 3139-3145.
- [25] V. Kushvaha, H. Tippur, Effect of filler shape, volume fraction and loading rate on dynamic fracture behavior of glass-filled epoxy, *Composites Part B: Engineering*, 64 (2014) 126–137.
- [26] M. Kouzeli, A. Mortensen, Size dependent strengthening in particle reinforced aluminium, *Acta Materialia*, 50 (2002) 39–51.
- [27] T. Mori, K. Tanaka, Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, *Acta Metallurgica*, 21 (1973) 571-574.
- [28] M. Cherkaoui, H. Sabar, M. Berveiller, Micromechanical approach of the coated inclusion problem and applications to composite materials, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 116 (1994) 274–278.
- [29] L. Capolungo, M. Cherkaoui, J. Qu, On the elastic-viscoplastic behavior of nanocrystalline materials, *International Journal of Plasticity*, 23 (2007) 561–591.
- [30] R. Christensen, K. Lo, Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 27 (1979) 315–330.
- [31] Q.-S. Zheng, D.-X. Du, An explicit and universally applicable estimate for the effective properties of multiphase composites which accounts for inclusion distribution, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 (2001) 2765–2788.
- [32] T. Chen, G. Dvorak, Fibrous nanocomposites with interface stress: Hill’s and Levin’s connections for effective moduli, *Applied Physics Letters*, 88 (2006) 211912.
- [33] H. Duan, X. Yi, Z. Huang, J. Wang, A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. part i: Theoretical framework, *Mechanics of Materials*, 39 (2007) 81–93.
- [34] A. Broohm, P. Zattarin, P. Lipinski, Prediction of mechanical behaviour of inhomogeneous and anisotropic materials using an incremental scheme, *Archives of Mechanics*, 6 (2000) 949–967.
- [35] J. L. Chaboche, P. Kanoute, A. Roos, On the capabilities of mean-field approaches for the description of plasticity in metal-matrix composites, *International Journal of Plasticity*, 21 (2005) 1409–1434.
- [36] A. Molinari, M. E. Mouden, The problem of elastic inclusions at finite concentration, *International Journal of Solids and Structures*, 33 (1996) 3131–3150.

- [37] M. E. Mouden, M. Cherkaoui, A. Molinari, M. Berveiller, The overall elastic response of materials containing coated inclusions in a periodic array, *International Journal of Engineering Science*, 36 (1998) 813–829.
- [38] S. Mercier, A. Molinari, M. E. Mouden, Thermal conductivity of composite material with coated inclusions: Applications to tetragonal array of spheroids, *Journal of Applied Physics*, 87 (2000) 3511–3519.
- [39] J. Segurado, C. Gonzalez, J. LLorca, A numerical investigation of the effect of particle clustering on the mechanical properties of composites, *Acta Materialia*, 51 (2003) 2355–2369.
- [40] J. Segurado, J. LLorca, Computational micromechanics of composites: The effect of particle spatial distribution, *Mechanics of Materials*, 38 (2006) 873–883.
- [41] E. Kroner, H. Koch, Effective properties of disordered materials, *Solid Mechanics Archives*, 1 (1976) 183–238.
- [42] P. P. Castaneda, J. Willis, The effect of spatial distribution on the effective behaviour of composite materials and cracked media, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 43 (1995) 1919–1951.
- [43] J. R. Willis, Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25 (1977) 185–202.
- [44] M. Bornert, C. Stolz, A. Zaoui, Morphologically representative pattern-based bounding in elasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44 (1996) 307–331.
- [45] V. Marcadon, E. Herve, A. Zaoui, Micromechanical modeling of packing and size effects in particulate composites, *International Journal of Solids and Structures*, 44 (2007) 8213–8228.
- [46] Z. Hashin, The elastic moduli of heterogeneous materials, *Journal of Applied Mechanics*, 29 (1962) 143–150.
- [47] J. Diani, P. Gilormini, Y. Merckel, F. Vion-Loisel, Micromechanical modeling of the linear viscoelasticity of carbon-black filled styrene butadiene rubbers: The role of the filler-rubber interphase, *Mechanics of Materials*, 59 (2013) 65–72.
- [48] B. Klusemann, H.J. Bhom, B. Svendsen, Homogenization methods for multi-phase elastic composites with non-elliptical reinforcements: Comparisons and benchmarks, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 34 (2012) 21–37.
- [49] P. Kanoute, D. P. Boso, J. L. Chaboche, B. A. Schrefler, Multiscale Methods for Composites: A Review, *Archives of Computational Methods in Engineering*, 16 (2009) 31–75.

- [50] K. Kowalczyk-Gajewska, H. Petryk, Sequential linearization method for viscous/elastic heterogeneous materials, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 30 (2011) 650-664.
- [51] C. Czarnota, K. Kowalczyk-Gajewska, A. Salahouelhadj, M. Martiny, S. Mercier, Modeling of the cyclic behavior of elastic-viscoplastic composites by the additive tangent Mori-Tanaka approach and validation by finite element calculations, *International Journal of Solids and Structures*, 56-57 (2015) 96-117.
- [52] R. Hill, Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11 (1963) 357-372.
- [53] R. Hill, Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13 (1965) 89-101.
- [54] G. P. Tandon, G. J. Weng, A theory of particle-reinforced plasticity, *Journal of Applied Mechanics*, 55 (1988) 126-135.
- [55] M. Majewski, M. Kurza, P. Holobut, K. Kowalczyk-Gajewska, Micromechanical and numerical analysis of packing and size effects in elastic particulate composites, *Composites Part B: Engineering*, 124 (2017) 158-174.
- [56] G.W. Milton, *The Theory of Composites*, Cambridge University Press, (2004).
- [57] J.Korelc, Multi-language and multi-environment generation of nonlinear finite element codes, *Engineering with Computers*, 18 (2002) 312-327.
- [58] J. Schöberl, NETGEN - An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules, *Computing and Visualization in Science*, 1(1997) 41-52.
- [59] Y. Jiang, K. Tohgo, Y. Shimamura, An analytical model to study the effective stiffness of the composites with periodically distributed sphere particles, *Composite Structures*, 92 (2010) 216-222.
- [60] L. J. Walpole, Elastic Behavior of Composite Materials: Theoretical Foundations, *Advances in Applied Mechanics*, 21 (1981) 169-236.
- [61] J. Rychlewski, Unconventional approach to linear elasticity, *Archives of Mechanics*, 47 (1995) 149-171.
- [62] K. Kowalczyk-Gajewska, J. Ostrowska-Maciejewska, Review on spectral decomposition of Hooke's tensor for all symmetry groups of linear elastic material, *Engineering Transactions*, 57 (2009) 145-183.
- [63] K. Kowalczyk-Gajewska, Bounds and self-consistent estimates of overall properties for random polycrystals described by linear constitutive laws, *Archives of Mechanics*, 61 (2009) 475-503.

- [64] V. Smilauer, E. Catalano, B. Chareyre, S. Dorofenko, J. Duriez, A. Gladky, J. Kozicki, C. Modenese, L. Scholtes, L. Sibille, J. Stransky, K. Thoeni, Yade Documentation, 1st Edition, The Yade Project, (2010).
- [65] T. G. Zielinski, Generation of random microstructures and prediction of sound velocity and absorption for open foams with spherical pores, *The Journal of the Acoustical Society of America*, 137 (2015) 1790-1801.
- [66] B. Widom, Random sequential addition of hard spheres to a volume, *The Journal of Chemical Physics*, 44 (1966) 3888-3894.
- [67] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties*, Springer-Verlag New York, 2002.
- [68] D. W. Cooper, Random-sequential-packing simulations in three dimensions for spheres, *Physical Review A*, 38 (1988) 522.
- [69] M. Ostoja-Starzewski, Material spatial randomness: From statistical to representative volume element, *Probabilistic engineering mechanics*, 21 (2006) 112-132.
- [70] P. Trovalusci, M. Ostoja-Starzewski, M. L. De Bellis, A. Murralli, Scale-dependent homogenization of random composites as micropolar continua, *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 49 (2015) 396-407.
- [71] O. Pierard, J. LLorca, J. Segurado, I. Doghri, Micromechanics of particle-reinforced elastoviscoplastic composites: Finite element simulations versus affine homogenization, *International Journal of Plasticity*, 23 (2007) 1041-1060.
- [72] T. Zohdi, P. Wriggers, *Introduction to Computational Micromechanics*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2005).
- [73] E. Herve, A. Zaoui, Modelling the effective behavior of non-linear matrix-inclusion composites, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 9 (1990) 505-516.
- [74] W.J.Drugin, J.R.Willis, A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44 (1996) 497-524.
- [75] M. Kurska, K. Kowalczyk-Gajewska, M. J. Lewandowski, H. Petryk, Elastic-plastic properties of metal matrix composites: Validation of mean-field approaches, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 68 (2018) 53-66.
- [76] H. Liu, S. Zhou, X. Li, Inferring the Size Distribution of 3D Particle Clusters in Metal Matrix Nanocomposites, *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 135 (2013) 011013:1-9.

- [77] X. Liang, S. Yu, R. Sun, S. Luo, J. Wan, Z. Zhuang, Microstructure and dielectric behavior of the three-phase Ag@SiO<sub>2</sub>/BaTiO<sub>3</sub>/PVDF composites with high permittivity, *Journal of Materials Research*, 27 (2012) 991-998.
- [78] M. A. Munoz-Morris , N. Calderon, I. Gutierrez-Urrutia, D. G. Morris, Matrix grain refinement in Al-TiAl composites by severe plastic deformation: Influence of particle size and processing route, *Materials Science and Engineering A*, 425 (2006) 131–137.
- [79] M. O. Bodunrin, K. K. Alaneme, L. H. Chown, Aluminium matrix hybrid composites: a review of reinforcement philosophies; mechanical, corrosion and tribological characteristics, *Journal of Materials Research and Technology*, 4 (2015) 434–445.
- [80] H. L. Quang, Q. C. He, G. Bonnet , Eshelby’s tensor fields and effective conductivity of composites made of anisotropic phases with Kapitza’s interface thermal resistance, *Philosophical Magazine*, 91 (2011) 3358-3392,
- [81] N. Kurti, B. V. Rollin, F. Simon, Preliminary experiments on temperature equilibria at very low temperatures *Physica*, 3 (1936) 266-274.
- [82] W. H. Keesom , A. P. Keesom, On the heat conductivity of liquid helium, *Physica*, 3 (1936) 359-360
- [83] S. B. Kapitza, Heat Transfer and Superfluidity of Helium II, *Physical Review*, 60 (1941) 354-355.
- [84] E. T. Swartz , R. O. Pohl, Thermal boundary resistance, *Reviews of Modern Physics*, 61 (1989) 605-615.
- [85] E. T. Swartz , R. O. Pohl, Thermal resistance at interfaces, *Applied Physics Letters*, 51 (1987) 2200-2202.
- [86] R. J. Stoner , H. J. Maris, Kapitza conductance and heat flow between solids at temperatures from 50 to 300 K, *Physical Review B*, 48 (1993) 16373-16383.
- [87] D. G. Cahill , W. K. Ford , K. E. Goodson , G. D. Mahan , H. J. Maris , R. Merlin, S. R. Phillpot, Nanoscale thermal transport, *Journal of Applied Physics*, 93 (2003) 793-818.
- [88] T. Wejrzanowski, M. Grybczuk, M. Wasiluk, K. J. Kurzydowski, Heat transfer through metal-graphene interfaces, *AIP Advances*, 5 (2015) 077142.
- [89] W. Cecot, M. Oleksy, High order FEM for multigrid homogenization, *Computers and Mathematics with Applications*, 70 (2015) 1391–1400.
- [90] Y. Benveniste , T. Miloh, The effective conductivity of composites with imperfect thermal contact at constituent interfaces, *International Journal of Engineering Science*, 24 (1986) 1537-1552.



- [91] Y. Benveniste, Effective thermal conductivity of composites with a thermal contact resistance between the constituents: Nondilute case, *Journal of Applied Physics*, 61 (1987) 2840-2845.
- [92] D. P. H. Hasselman , L. F. Johnson, Effective Thermal Conductivity of Composites with Interfacial Thermal Barrier Resistance *Journal of Composite Materials*, 21 (1987) 508-515.
- [93] R. Lipton , B. Vernescu, Composites with imperfect interface, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*, 452 (1996a) 329-358.
- [94] R. Lipton , B. Vernescu, Critical radius, size effects and inverse problems for composites with imperfect interface, *Journal of Applied Physics*, 79 (1996b) 8964-8966.
- [95] S. Torquato , M. D. Rintoul, Effect of the Interface on the Properties of Composite Media, *Physical Review Letters*, 75 (1995) 4067-4071.
- [96] H. Cheng , S. Torquato, Effective conductivity of periodic arrays of spheres with interfacial resistance *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*, 453 (1997) 145-161.
- [97] C. W. Nan , R. Birringer , D. R. Clarke , H. Gleiter, Effective thermal conductivity of particulate composites with interfacial thermal resistance *Journal of Applied Physics*, 81 (1997) 6692-6698.
- [98] Z. Hashin, Thin interphase/imperfect interface in conduction, *Journal of Applied Physics*, 84 (2001) 2261-2267.
- [99] M. L. Dunn , M. Taya, The effective thermal conductivity of composites with coated reinforcement and the application to imperfect interfaces, *Journal of Applied Physics*, 73 (1993) 1711-1716.
- [100] H. Hatta , M. Taya, Equivalent inclusion method for steady state heat conduction in composites, *International Journal of Engineering Science*, 24 (1986a) 1159-1172.
- [101] H. Hatta , M. Taya, Thermal conductivity of coated filler composites, *Journal of Applied Physics*, 59 (1986b) 1851-1860.
- [102] T. Miloh , Y. Benveniste, On the effective conductivity of composites with ellipsoidal inhomogeneities and highly conducting interfaces, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*, 455 (1999) 2687-2706.
- [103] Y. Benveniste, A general interface model for a three-dimensional curved thin anisotropic interphase between two anisotropic media, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 (2006) 708-734.

- [104] S. Lee, J. Lee, B. Ryu, S. Ryu. A micromechanics-based analytical solution for the effective thermal conductivity of composites with orthotropic matrices and interfacial thermal resistance, *Scientific Reports*, 8 (2018) 7266.
- [105] Y. Lee, R. Yang, S. Gau, A generalized self-consistent method for calculation of effective thermal conductivity of composites with interfacial contact conductance, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 33 (2006) 142–150.
- [106] P. S. Theocaris, *The Mesophase Concept in Composites*. Springer-Verlag, Berlin, (1987).
- [107] T. Mura, R. Furuhashi, The elastic inclusion with a sliding interface, *Journal of Applied Mechanics*, 51 (1984) 308–310.
- [108] J. Schiotz, F. D. Di Tolla, K. W. Jacobsen, Softening of nanocrystalline metals at very small grain sizes, *Nature*, 391 (1998) 561–563.
- [109] Y. J. Wei, Y.J., L. Anand, L., Grain-boundary sliding and separation in polycrystalline metals: application to nanocrystalline fcc metals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 52 (2004) 2587–2616.
- [110] T. Y. Zhang, J. E. Hack, On the elastic stiffness of grain boundaries, *Physica Status Solidi (A)*, 131 (1992) 437–443.
- [111] Z. Hashin, The spherical inclusion with imperfect interface, *Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 58 (1991) 444-449.
- [112] M. E. Gurtin, A. I. Murdoch, A continuum theory of elastic material surfaces, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57 (1975) 291–323.
- [113] L. J. Walpole, A coated inclusion in an elastic medium, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 83 (1978) 495–506.
- [114] J. Aboudi, *Mechanics of Composite Materials – A Unified Micromechanical Approach*, Elsevier, Amsterdam, (1991).
- [115] B. L. Karihaloo, K. Viswanathan, A partially debonded ellipsoidal inclusion in an elastic medium Part I. Stress and displacement fields, *Mechanics of Materials*, 7 (1988a) 191–197.
- [116] B. L. Karihaloo, K. Viswanathan, A partially debonded ellipsoidal inclusion in an elastic medium. Part II. Stress intensity factors and debond opening displacement, *Mechanics of Materials*, 7 (1988b) 199–203.
- [117] J. Qu, The effect of slightly weakened interfaces on the overall elastic properties of composites, *Mechanics of Materials*, 14 (1993) 269–281.

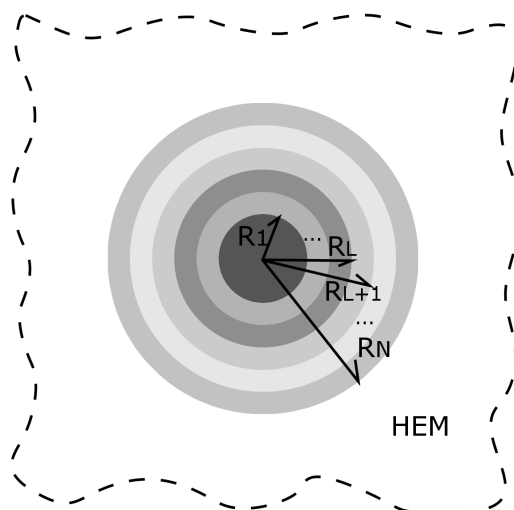
- [118] Z. Zhong, S. A. Meguid, On the elastic field of a spherical inhomogeneity with an imperfectly bonded interface, *Journal of Elasticity*, 46 (1997) 91–113.
- [119] H. L. Duan, J. Wang, Z. P. Huang, B. L. Karihaloo, Sizedependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53 (2005a) 1574–1596.
- [120] H. L. Duan, J. Wang, Z. P. Huang, B. L. Karihaloo, Eshelby formalism for nano-inhomogeneities, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*, 461 (2005b) 3335–3353.
- [121] H. L. Duan, J. Wang, Z. P. Huang, Z. Y. Luo, Stress concentration tensors of inhomogeneities with interface effects, *Mechanics of Materials*, 37 (2005c) 723–736.
- [122] H. L. Duan, J. Wang, Z. P. Huang, Y. Zhong, Stress fields of a spheroidal inhomogeneity with an interphase in an infinite medium under remote loadings, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences*, 461 (2005d) 1055–1080.
- [123] H. K. Lee, S. H. Pyo, Micromechanics-based elastic damage modeling of particulate composites with weakened interfaces, *International Journal of Solids and Structures*, 44 (2007) 8390–8406.
- [124] P. Smith, S. Torquato, Computer simulation results for the two-point probability function of composite media, *Journal of Computational Physics*, 76 (1988) 176–191.
- [125] I. Doghri, A. Ouair, Homogenization of two-phase elasto-plastic composite materials and structures. Study of tangent operators, cyclic plasticity and numerical algorithms, *International Journal of Solids and Structures*, 40 (2003) 1681–1712.
- [126] J. Chaboche, Time-independent constitutive theories for cyclic plasticity, *International Journal of Plasticity*, 2 (1986) 148–188.
- [127] H. Berger, S. Kari, U. Gabbert, R. Rodriguez-Ramos, J. Bravo-Castillero, R. Guinovart-Diaz, A comprehensive numerical homogenisation technique for calculating effective coefficients of uniaxial piezoelectric fibre composites, *Materials Science and Engineering: A*, 412 (2005) 53–60.
- [128] C. P. Wong, R. S. Bollampally, Thermal conductivity, elastic modulus, and coefficient of thermal expansion of polymer composites filled with ceramic particles for electronic packaging, *Applied Polymer*, 74 (1999) 3396–3403.
- [129] P. Sadowski, K. Kowalczyk-Gajewska, S. Stupkiewicz, Consistent treatment and automation of the incremental Mori–Tanaka scheme for elasto-plastic composites, *Computational Mechanics*, 60 (2017) 493–511.

- [130] A. Cazzani, M. Rovati, Extrema of Young's modulus for cubic and transversely isotropic solids, *International Journal of Solids and Structures*, 40 (2003) 1713–1744.
- [131] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids*, Rozdział: The Percolation Model, Wiley-VCH, (2007) 135-204.
- [132] L. Benguigui, Experimental Study of the Elastic Properties of a Percolating System, *Physical Review Letters*, 53 (1984) 2028-2030.
- [133] D.Krajcinovic, K.Mallick, M. Basista, D. Sumarac, Elastic moduli of perforated plates in the neighborhood of critical state, *International Journal of Solids and Structures*, 29 (1992) 1837-1847.
- [134] M. Chmielewski (E.d.), Raport wewnętrzny: Sprawozdanie z charakteryzacji mikrostruktury i wybranych właściwości materiałów kompozytowych na bazie NiAl, Instytut Technologii Materiałów Elektronicznych, Warszawa, Polska, (2015).
- [135] M. Basista (E.d.), Raport wewnętrzny z realizacji zadania wytworzenia kompozytów na bazie NiAl w projekcie: Wieloskalowe modelowanie materiałów niejednorodnych: opis ewolucji mikrostruktury i efekt skali, Instytut Podstawowych Problemów Techniki, Polska Akademia Nauk, Warszawa, Polska, (2014).
- [136] D.Kaliński, M.Chmielewski, K.Pietrzak, K. Choregiewicz, An influence of mechanical mixing and hot-pressing on properties of NiAl/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composite, *Archives of Metallurgy and Materials*, 57 (2012) 694-702.
- [137] S.Nosewicz, J.Rojek, S.Mackiewicz, M. Chmielewski, K. Pietrzak, B.Romelczyk, The influence of hot pressing conditions on mechanical properties of nickel aluminate/alumina composite, *Journal of Composite Materials*, 48 (2014) 3577-3589.
- [138] M.Chmielewski, S.Nosewicz, K.Pietrzak, J.Rojek, A.Strojny-Nędza, S.Mackiewicz, J.Dutkiewicz, Sintering behavior and mechanical properties of NiAl, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and NiAl-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composites, *Journal of Materials Engineering and Performance*, 23 (2014) 3875–3886.
- [139] C.L.Hsieh, W.H.Tuan, T.T.Wu, Elastic behaviour of a model two-phase material, *Journal of the European Ceramic Society*, 24 (2004) 3789–3793.
- [140] S.Nogales, H.J.Bohna, Modeling of the thermal conductivity and thermomechanical behavior of diamond reinforced composites, *International Journal of Engineering Science*, 46 (2008) 606–619.
- [141] I. Sevostianov, M. Kachanov, Relations between compliances of inhomogeneities having the same shape but different elastic constants, *International Journal of Engineering Science*, 45 (2007) 797–806.

## Dodatek A

# Tensory koncentracji pola gradientu temperatury dla schematów (N+1)-GSC i SC

Zakładamy N-fazową sferę kompozytową umieszczoną w jednorodnym ośrodku o efektywnych właściwościach (Rys.A.1), co odpowiada wzorcowi (N+1)-GSC. W nieskończoności zadano jednorodny gradient temperatury. Wszystkie fazy  $l \in (1, \dots, N)$  rozpatrujemy jako izotropowe  $\mathcal{K}_l = k_l \mathbf{I}$ , gdzie  $\mathbf{I}$  to jednostkowy tensor drugiego rzędu.



Rysunek A.1: Schematyczna reprezentacja N-fazowej sfery kompozytowej umieszczonej w medium o efektywnych właściwościach odpowiadającej modelowi (N+1)-GSC.  $R_l$  – promień sfery dla fazy  $l$ ,  $HEM$  - jednorodny ośrodek o efektywnych właściwościach.

Warunki ciągłości uwzględniające występowanie oporu cieplnego Kapitzy na granicy  $r = R_l$  faz  $l$  i  $l + 1$  są następujące:

$$T_{l+1} = T_l - \alpha_l k_l \frac{\partial T_l}{\partial r} \quad \wedge \quad k_{l+1} \frac{\partial T_{l+1}}{\partial r} = k_l \frac{\partial T_l}{\partial r}. \quad (\text{A.1})$$

Dla założonego kompozytu w układzie sferycznym o początku w środku sfery kompozytowej pole temperatury zależy tylko od promienia wodzącego  $r$ . Funkcję rozkładu temperatury przyjęto w postaci:

$$T_l(r) = A_l r + \frac{B_l}{r^2} = [r, 1/r^2] \cdot [A_l, B_l]^T = [r, 1/r^2] \cdot \mathbf{F}_l \quad \frac{\partial T_l(r)}{\partial r} = A_l - 2 \frac{B_l}{r^3} = [1, -2/r^3] \cdot \mathbf{F}_l, \quad (\text{A.2})$$

w której  $\mathbf{F}_l$  jest transponowanym wektorem stałych  $[A_l, B_l]$ .

Warunki ciągłości pola temperatury i strumienia ciepła uwzględniające występowanie oporu cieplnego Kapitzy (Eq.A.1) między sąsiadującymi fazami  $l$  i  $l + 1$  dla  $r = R_l$  w zapisie macierzowym mają postać:

$$\mathbf{V}_l \cdot \mathbf{F}_l = \mathbf{W}_{l+1} \cdot \mathbf{F}_{l+1} \rightarrow \mathbf{F}_{l+1} = \mathbf{W}_{l+1}^{-1} \cdot \mathbf{V}_l \cdot \mathbf{F}_l \rightarrow \mathbf{F}_{l+1} = \mathbf{H}_l \cdot \mathbf{F}_l, \quad (\text{A.3})$$

gdzie macierze:

$$\mathbf{V}_l(r) = \begin{bmatrix} r - \alpha_l k_l & 1/r^2 + 2\alpha_l k_l / r^3 \\ k_l & -2k_l / r^3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{W}_{l+1}(r) = \begin{bmatrix} r & 1/r^2 \\ k_{l+1} & -2k_{l+1} / r^3 \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$

powstały z przekształcenia warunków ciągłości (Eq.A.1) zgodnie z przyjętą funkcją rozkładu temperatury  $T(r)$  (Eq.A.2).

Macierz  $\mathbf{H}_l$  jest dana zależnością:

$$\mathbf{H}_l = \mathbf{W}_{l+1}^{-1} \cdot \mathbf{V}_l = \frac{1}{3k_{l+1}r^4} \begin{bmatrix} r^3(2k_{l+1}r + k_l(r - 2k_{l+1}\alpha_l)) & -2k_l r + 2k_{l+1}r + 4k_l k_{l+1}\alpha_l \\ r^6(k_{l+1}r - k_l(r + k_{l+1}\alpha_l)) & r^3(k_{l+1}r + 2k_l(r + k_{l+1}\alpha_l)) \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

w której  $k_{N+1} = \bar{k}$  jest poszukiwanym efektywnym współczynnikiem przewodzenia ciepła nieskończonego ośrodka w jakim zanurzono sferę kompozytową, podczas gdy promienie  $R_l$  są zobrazowane na Rys.A.1.

Tensory koncentracji gradientu temperatury

$$\mathbf{A}_l^{\text{NGSC}} = \alpha_{\text{T}l}^{\text{NGSC}} \mathbf{I} \quad (\text{A.6})$$

są obliczone poprzez wyznaczenie średniej z lokalnego gradientu temperatury w poszczególnych fazach  $l$ . Współczynniki  $\alpha_{\text{T}l}^{\text{NGSC}}$  wyrażają się następującą formułą:

$$\alpha_{\text{T}l}^{\text{NGSC}} = \begin{cases} \frac{1}{Q^{(N)}_{1,1}} & \text{dla } l = 1, \\ \frac{Q^{(l-1)}_{1,1}}{Q^{(N)}_{1,1}} & \text{dla } l = 2, \dots, N, \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

gdzie macierz  $\mathbf{Q}(l)$  ma postać:

$$\mathbf{Q}(l) = \begin{cases} \mathbf{H}_1 & \text{dla } l = 1, \\ \mathbf{H}_l \mathbf{Q}(l-1) & \text{for } l = 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

Dla  $N = 2$  zależność (A.7) redukuje się do współczynników tensorów koncentracji  $\alpha_{\text{T}l}^{\text{GSC}}$  odpowiednich dla klasycznego modelu GSC przedstawionego w pracy [80].

Dla schematu samozgodnego tensor koncentracji  $\mathbf{A}_l^{\text{SC}}$ , przy założeniu sferycznego kształtu inkluzji  $l$  i bez oporu cieplnego Kapitzy, wyraża się wzorem:

$$\mathbf{A}_l^{\text{SC}} = \alpha_{\text{T}l}^{\text{SC}} \mathbf{I} \quad \text{gdzie} \quad \alpha_{\text{T}l}^{\text{SC}} = \frac{3\bar{k}}{k_l + 2\bar{k}}, \quad (\text{A.9})$$

natomiast z oporem cieplnym Kapitzy  $\alpha$  na granicy faz  $R_l$  jest następujący [104] [80]:

$$\alpha_{\text{T}l}^{\text{SC}} = \frac{3\bar{k}}{k_l + 2\bar{k} + 2\bar{k} k_l \alpha / R_l}. \quad (\text{A.10})$$

Na podstawie opisanego w niniejszym rozdziale rozwiązania (problem sfery kompozytowej) można zauważyć, że tensor koncentracji dla jednorodnej sfery o promieniu  $R_l$  z oporem cieplnym Kapitzy  $\alpha$  na granicy, umieszczonej w nieskończonym medium o efektywnych właściwościach, jest jednakowy jak ten uzyskany dla schematu SC przy wykorzystaniu rozwiązania Eshelby'ego, tzn.  $\alpha_{\text{T}l}^{2-\text{GSC}} = \alpha_{\text{T}l}^{\text{SC}}$ . Dla prostszego przypadku  $\alpha = 0$  także otrzymujemy  $\alpha_{\text{T}l}^{2-\text{GSC}} = \alpha_{\text{T}l}^{\text{SC}}$ .

## Dodatek B

# Tensory koncentracji odkształcenia dla schematów (N+1)-GSC i SC

Zaprezentowany tok przekształceń jest analogiczny jak w pracy [73] dla sfery kompozytowej z idealnym połączeniem faz, który zmodyfikowano o podatny interfejs opisany w pracy [111]. Zakładamy N-fazową sferę kompozytową umieszczoną w medium o efektywnych właściwościach (Rys.A.1), co odpowiada wzorcowi (N+1)-GSC. Wszystkie fazy  $l \in (1, \dots, N)$  rozpatrujemy jako izotropowe  $\mathbb{L}_l = K_l \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2G_l \left( \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right)$ , gdzie  $\mathbf{I}$  i  $\mathbb{I}$  to kolejno tensory jednostkowe drugiego i czwartego rzędu. Tensory koncentracji wyrażają się przez dwa współczynniki ( $\alpha_P, \alpha_D$ ) odpowiadające kolejno za stan hydrostatyczny i stan dewiatorowy, a mianowicie:

$$\mathbb{A} = \alpha_P^{\text{NGSC}} \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \alpha_D^{\text{NGSC}} \left( \mathbb{I} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} \right). \quad (\text{B.1})$$

Wzajemna ortogonalność stanów hydrostatycznego i dewiatorowego pozwala na wyznaczenie osobno obu współczynników tensora koncentracji zadając kolejno hydrostatyczny i dewiatorowy jednorodny stan odkształcenia w nieskończoności.

Wyznaczenie współczynników  $\alpha_P^{\text{NGSC}}$  odpowiadających za część hydrostatyczną odkształcenia można sprowadzić do zagadnienia jednowymiarowego zależnego od promienia wodzącego  $r$  w sferycznym układzie  $(r, \theta, \phi)$ . Warunki ciągłości uwzględniające występowanie podatnego interfejsu na granicy  $r = R_l$  faz  $l$  i  $l + 1$  są następujące:

$$u_{l+1}^{(r)} = u_l^{(r)} + \eta_l \sigma_l^{(rr)} \quad \wedge \quad \sigma_{l+1}^{(rr)} = \sigma_l^{(rr)}, \quad (\text{B.2})$$

gdzie  $\eta_l$  to parametr interfejsu, odpowiedzialny za składową normalną skoku wektora przemieszczenia (ang. normal component of compliance layer) na granicy  $r = R_l$ . Przemieszczenia promieniowe  $u^{(r)}$  przyjęto w postaci:

$$u_l^{(r)}(r) = A_l r + \frac{B_l}{r^2} = [r, 1/r^2] \cdot [A_l, B_l]^T = [r, 1/r^2] \cdot \mathbf{F}_l, \quad (\text{B.3})$$

a stąd naprężenie promieniowe  $\sigma^{(rr)}$  wyraża się poniższą zależnością:

$$\sigma_l^{(rr)}(r) = 3K_l A_l - \frac{4G_l B_l}{r^3} = [3K_l, -\frac{4G_l}{r^3}] \cdot [A_l, B_l]^T = [3K_l, -\frac{4G_l}{r^3}] \cdot \mathbf{F}_l, \quad (\text{B.4})$$



w której  $F_l$  jest transponowanym wektorem stałych  $[A_l, B_l]$ .

Warunki ciągłości uwzględniające występowanie podatnego interfejsu (Eq.B.2) między sąsiadującymi fazami  $l$  i  $l + 1$  dla  $r = R_l$  w zapisie macierzowym mają postać:

$$V_l \cdot F_l = W_{l+1} \cdot F_{l+1} \rightarrow F_{l+1} = W_{l+1}^{-1} \cdot V_l \cdot F_l \rightarrow F_{l+1} = H_l \cdot F_l \quad , \quad (\text{B.5})$$

w której macierze

$$V_l(r) = \begin{bmatrix} 3K_l \eta_l + r & \frac{r-4G_l \eta_l}{r^3} \\ 3K_l & -4G_l/r^3 \end{bmatrix} \quad W_{l+1}(r) = \begin{bmatrix} r & 1/r^2 \\ 3K_{l+1} & -4G_{l+1}/r^3 \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

powstały z przekształcenia warunków ciągłości (Eq.B.2) zgodnie z przyjętą funkcją przemieszczeń  $u^{(r)}(r)$  (Eq.B.3). Macierz  $H_l$  jest następująca

$$H_l = W_{l+1}^{-1} \cdot V_l = \frac{1}{(4G_{l+1} + 3K_{l+1})r^4} \begin{bmatrix} r^3(3K_l r + 4G_{l+1}(3K_l \eta_l + r)) & 4(G_{l+1}r - G_l(4\eta_l G_{l+1} + r)) \\ 3r^6(3K_l \eta_l K_{l+1} + rK_{l+1} - K_l r) & r^3(3K_{l+1} r + 4G_l(r - 3\eta_l K_{l+1})) \end{bmatrix} \quad (\text{B.7})$$

gdzie  $K_{N+1} = \bar{K}$  i  $G_{N+1} = \bar{G}$  są poszukiwanymi efektywnymi modułami nieskończonego ośrodka w którym zanurzono sferę kompozytową, podczas gdy promienie  $R_l$  są zobrazowane na Rys.A.1. Współczynnik  $\alpha_P^{NGSC}$  części hydrostatycznej tensora koncentracji, obliczony na podstawie powyższych zależności wyraża się następująco:

$$\alpha_P^{NGSC} = \begin{cases} \frac{1}{Q(n)_{1,1}} & \text{dla } l = 1, \\ \frac{Q(l-1)_{1,1}}{Q(n)_{1,1}} & \text{dla } l = 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

gdzie macierz  $Q(l)$  ma postać

$$Q(l) = \begin{cases} H(1) & \text{dla } l = 1, \\ H(l)Q(l-1) & \text{dla } l = 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

W celu wyznaczenia współczynnika  $\alpha_D$  dla części dewiatorowej tensora koncentracji zakłada się dewiatorowy jednorodny stan odkształcenia w nieskończoności (np. czyste ścinanie lub isochoryczne rozciąganie [111]). Warunki ciągłości uwzględniające występowanie podatnego interfejsu na granicy  $r = R_l$  faz  $l$  i  $l + 1$  są w takim przypadku następujące:

$$\begin{aligned} u_{l+1}^{(r)} &= u_l^{(r)} + \eta_l \sigma_l^{(rr)} & \sigma_{l+1}^{(rr)} &= \sigma_l^{(rr)} \\ u_{l+1}^{(\theta)} &= u_l^{(\theta)} + \mu_l \sigma_l^{(r\theta)} & \sigma_{l+1}^{(r\theta)} &= \sigma_l^{(r\theta)} \end{aligned} \quad , \quad (\text{B.10})$$

gdzie  $\mu_l$  to parametr liniowego podatnego interfejsu (podrozdział 2.3.2), odpowiedzialny za składową styczną skoku wektora przemieszczenia (ang. tangent component of compliance layer) na granicy  $r = R_l$ .

Część funkcji rozkładu przemieszczeń zależna od promienia wodzącego  $r$ :  $(u^{(r)}, u^{(\theta)}, u^{(\phi)})$  przyjęto w postaci:

$$\begin{aligned} u_l^{(r)} &= A_l r - \frac{6B_l \nu_l r^3}{1-2\nu_l} + \frac{3C_l}{r^4} + \frac{D_l(5-4\nu_l)}{(1-2\nu_l)r^2} \\ u_l^{(\theta)} &= A_l r - \frac{B_l(7-4\nu_l)r^3}{1-2\nu_l} - \frac{2C_l}{r^4} + \frac{2D_l}{r^2} \\ u_l^{(\phi)} &= -u_l^{(\theta)} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Pełną postać funkcji rozkładu przemieszczeń  $\mathbf{u}(r, \theta, \phi)$  można znaleźć np. w pracy [111]. Część funkcji zależna od promienia wodzącego  $r$  dla naprężenia:  $(\sigma^{(rr)}, \sigma^{(r\theta)})$  wyraża się następująco:

$$\begin{aligned} \sigma_l^{(rr)}(r) &= A_l G_l + \frac{3B_l \nu_l G_l r^2}{1-2\nu_l} - \frac{12C_l G_l}{r^5} + \frac{2D_l(\nu_l-5)G_l}{(1-2\nu_l)r^3} \\ \sigma_l^{(r\theta)}(r) &= A_l G_l - \frac{B_l(2\nu_l+7)G_l r^2}{1-2\nu_l} + \frac{8C_l G_l}{r^5} + \frac{2D_l(\nu_l+1)G_l}{(1-2\nu_l)r^3} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

W dalszych przekształceniach części dewiatorowej w zapisie macierzowym wykorzystano notację jak dla części hydrostatycznej. Warto podkreślić, że są to dwa osobne wyprowadzenia, a zatem znaczenie pomocniczych wielkości  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{V}$  oraz  $\mathbf{W}$  jest inne. Warunki ciągłości uwzględniające występowanie podatnego interfejsu B.10 między sąsiadującymi fazami  $l$  i  $l+1$  dla  $r = R_l$  w zapisie macierzowym mają postać:

$$\mathbf{V}_l \cdot \mathbf{F}_l = \mathbf{W}_{l+1} \cdot \mathbf{F}_{l+1} \rightarrow \mathbf{F}_{l+1} = \mathbf{W}_{l+1}^{-1} \cdot \mathbf{V}_l \cdot \mathbf{F}_l \rightarrow \mathbf{F}_{l+1} = \mathbf{H}_l \cdot \mathbf{F}_l \quad , \quad (\text{B.13})$$

gdzie  $\mathbf{F}_l$  to transponowany wektor stałych  $[A_l, B_l, C_l, D_l]$  zaś macierze

$$\mathbf{V}_l(r) = \begin{bmatrix} G_l \eta_l + r & \frac{3\nu_l r^2(2r-G_l \eta_l)}{2\nu_l-1} & \frac{3(r-4G_l \eta_l)}{r^5} & \frac{(4\nu_l-5)r-2(\nu_l-5)G_l \eta_l}{(2\nu_l-1)r^3} \\ G_l \mu_l + r & \frac{r^2((2\nu_l+7)G_l \mu_l + (7-4\nu_l)r)}{2\nu_l-1} & -\frac{2(r-4G_l \mu_l)}{r^5} & \frac{2\left(\frac{(\nu_l+1)G_l \mu_l}{1-2\nu_l} + r\right)}{r^3} \\ G_l & \frac{3\nu_l G_l r^2}{1-2\nu_l} & -\frac{12G_l}{r^5} & \frac{2(\nu_l-5)G_l}{(1-2\nu_l)r^3} \\ G_l & \frac{(2\nu_l+7)G_l r^2}{2\nu_l-1} & \frac{8G_l}{r^5} & \frac{2(\nu_l+1)G_l}{(1-2\nu_l)r^3} \end{bmatrix} \quad (\text{B.14})$$

$$\mathbf{W}_{l+1}(r) = \begin{bmatrix} r & \frac{6\nu_{l+1}r^3}{2\nu_{l+1}-1} & \frac{3}{r^4} & \frac{4\nu_{l+1}-5}{(2\nu_{l+1}-1)r^2} \\ r & \frac{(7-4\nu_{l+1})r^3}{2\nu_{l+1}-1} & -\frac{2}{r^4} & \frac{2}{r^2} \\ G_{l+1} & \frac{3\nu_{l+1}G_{l+1}r^2}{1-2\nu_{l+1}} & -\frac{12G_{l+1}}{r^5} & \frac{2(\nu_{l+1}-5)G_{l+1}}{(1-2\nu_{l+1})r^3} \\ G_{l+1} & \frac{(2\nu_{l+1}+7)G_{l+1}r^2}{2\nu_{l+1}-1} & \frac{8G_{l+1}}{r^5} & \frac{2(\nu_{l+1}+1)G_{l+1}}{(1-2\nu_{l+1})r^3} \end{bmatrix}$$

powstały z przekształcenia warunków ciągłości (Eq.B.10) przez podstawienie przyjętej funkcji rozkładu przemieszczeń  $(u^{(r)}, u^{(\theta)}, u^{(\phi)})$  (Eq.B.11). Wprowadzamy macierz  $\mathbf{H}_l = \mathbf{W}_{l+1}^{-1} \cdot \mathbf{V}_l$ . Ponownie w macierzy  $\mathbf{H}_l$  stałe  $G_{N+1} = \tilde{G}$  i  $\nu_{N+1} = \tilde{\nu}$  są szukanymi efektywnymi parametrami materiałowymi nieskończonego ośrodka.

Współczynniki opisujące część dewiatorową tensorów koncentracji odkształceń,  $\alpha_{D_l}^{\text{NGSC}}$ , otrzymuje się z równań

$$\alpha_{D_l}^{\text{NGSC}} = \begin{cases} \frac{a(1)_{1-\frac{21}{5}}R_1^5}{(1-2\nu_1)R_1^3} a(1)_2 & \text{dla } l = 1 \\ \frac{a(l)_{1-\frac{21}{5}}(R_l^5 - R_{l-1}^5)}{(1-2\nu_l)(R_l^3 - R_{l-1}^3)} a(l)_2 & \text{dla } l = 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

gdzie  $\mathbf{a}(l)$  są następującymi wektorami

$$\mathbf{a}(l) = \frac{1}{J_n^P} \begin{pmatrix} P(l-1)_{11} & P(l-1)_{12} \\ P(l-1)_{21} & P(l-1)_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P(n)_{22} \\ -P(n)_{21} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}(l) = \begin{cases} \mathbf{M}(1) & \text{dla } l = 1 \\ \mathbf{M}(l)\mathbf{P}(l-1) & \text{dla } l = 2, \dots, N \end{cases} \quad (\text{B.16})$$

i  $P(0)_{lj} = \delta_{lj}$ ,  $J_n^P = P(n)_{11}P(n)_{22} - P(n)_{12}P(n)_{21}$ , podczas gdy

$$\mathbf{M}(k) = \mathbf{H}(l+1, R_l)\mathbf{H}(l, R_l). \quad (\text{B.17})$$

Dla  $N = 2$  i dla zerowego liniowego podatnego interfejsu ( $\Psi(\eta, \mu) = \mathbf{0}$  Eq.2.25) formuły Eq.B.8 i Eq.B.15 redukują się do odpowiednich współczynników tensorów koncentracji  $\alpha_{\text{P}l}^{\text{GSC}}$  i  $\alpha_{\text{D}l}^{\text{GSC}}$  odpowiednich dla klasycznego modelu GSC z pracy [73].

Z opisanego w niniejszym rozdziale rozwiązania otrzymujemy współczynniki tensora koncentracji odkształceń dla jednorodnej sfery o promieniu  $R_l$  z podatnym interfejsem  $\Psi(\eta, \mu)$  umieszczonej w nieskończonym ośrodku o efektywnych właściwościach, w następującej formie ( $l = 1$ ):

$$\alpha_{\text{P}l}^{2-\text{GSC}} = \frac{4\bar{G}+3\bar{K}}{4\bar{G}+3K_l+12\bar{G}K_l\eta/R_l},$$

$$\alpha_{\text{D}l}^{2-\text{GSC}} = [\bar{G}R_l(4\bar{G} + 3\bar{K})(4\bar{G}(3K_l(57\eta G_l + 20R_l + 38G_l\mu) + 2G_l(6\eta G_l + 85R_l + 4G_l\mu)) + 5R_lG_l(57K_l + 4G_l))] / [32\bar{G}^3(G_l\mu(57K_l\eta G_l + 30K_lR_l + 4\eta G_l^2 + 22R_lG_l) + R_l(39K_l\eta G_l + 12K_lR_l + 16\eta G_l^2 + 34R_lG_l)) + 4\bar{G}^2(9\bar{K}(G_l\mu(57K_l\eta G_l + 30K_lR_l + 4\eta G_l^2 + 22R_lG_l) + R_l(39K_l\eta G_l + 12K_lR_l + 16\eta G_l^2 + 34R_lG_l)) + 2R_lG_l(3K_l(76\eta G_l + 43R_l + 57G_l\mu) + 4G_l(4\eta G_l + 52R_l + 3G_l\mu))) + 3\bar{G}R_lG_l(\bar{K}(3K_l(114\eta G_l + 89R_l + 95G_l\mu) + 4G_l(6\eta G_l + 71R_l + 5G_l\mu)) + 4R_lG_l(57K_l + 4G_l)) + 6\bar{K}R_l^2G_l^2(57K_l + 4G_l)] . \quad (\text{B.18})$$

Dla doskonałego połączenia faz  $\Psi(\eta, \mu) = \mathbf{0}$  wyrażenia  $\alpha_{\text{P}l}^{2-\text{GSC}}$  i  $\alpha_{\text{D}l}^{2-\text{GSC}}$  redukują się do postaci:

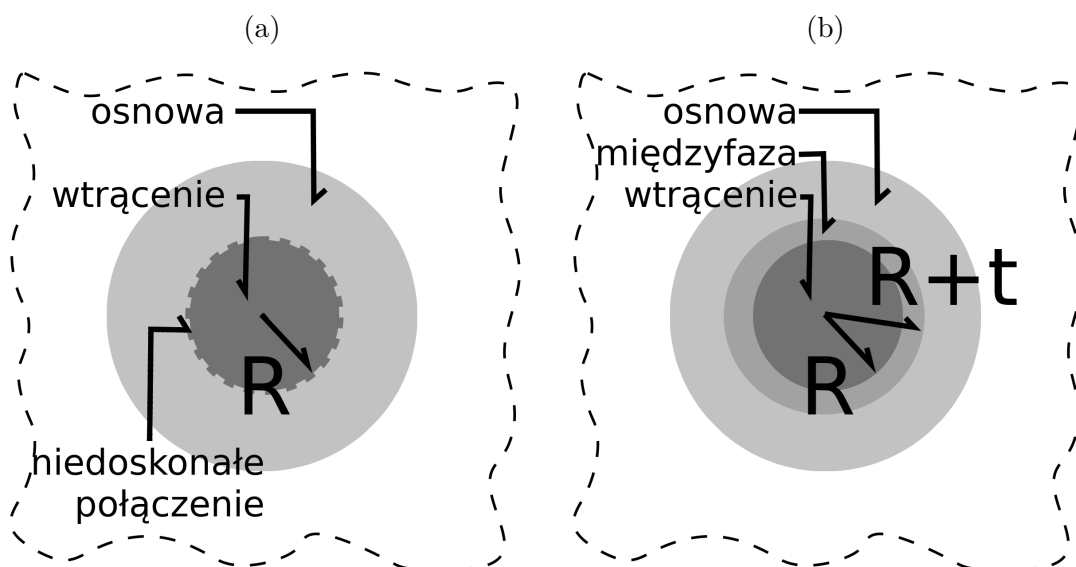
$$\alpha_{\text{P}l}^{2-\text{GSC}} = \frac{3\bar{K} + 4\bar{G}}{3K_l + 4\bar{G}}, \quad \alpha_{\text{D}l}^{2-\text{GSC}} = \frac{5\bar{G}(3\bar{K} + 4\bar{G})}{2G_l(3\bar{K} + 6\bar{G}) + \bar{G}(9\bar{K} + 8\bar{G})} \quad (\text{B.19})$$

i są jednakowe z rozwiązaniem uzyskanym dla schematu SC [46] [123].

## Dodatek C

# Schemat $(N+1)$ -GSC: niedoskonały interfejs a międzyfaza na granicy faz

Rozmiar wtrąceń wpływa na efektywne parametry materiałowe kompozytu gdy na granicy faz występuje międzyfaza, bądź połączenie pomiędzy fazami nie jest idealne. Oba przypadki schematycznie zaprezentowano na Rys.C.1, kolejno: (a) niedoskonałe połączenie na granicy faz, (b) płaszcz międzyfazy wokół wtrącenia. Oznaczenia faz są następujące:  $i$  – wtrącenia,  $int$  – międzyfaza,  $m$  – osnowa.



Rysunek C.1: Schematyczna reprezentacja sfery kompozytowej, (a) 2-fazowej i (b) 3-fazowej, umieszczonej w medium o efektywnych właściwościach.  $R$  – promień sfery fazy wtrąceń, (a) przerywana linia wokół sfery – niedoskonałe połączenie na granicy faz opisane parametrem:  $\alpha$  w zagadnieniu przewodzenia ciepła lub  $\eta$  i  $\mu$  w sprężystości, (b)  $t$  – grubość powłoki międzyfazowej.

**Przewodzenie ciepła.** Niedoskonałe połączenie zaprezentowane na Rys.C.1.a w zagadnieniu przewodzenia ciepła w rozprawie doktorskiej jest określone za pomocą oporu cieplnego Kapitzy  $\alpha$  (podrozdział 2.2.2). Na granicy między fazami pojawia się opór cieplny – strumień ciepła pozostaje ciągły, ale temperatura ulega skokowi (Eq.2.9). Aby skorzystać z algorytmu z dodatku A wszystkie fazy rozpatrujemy jako izotropowe. W zagadnieniu przewodzenia ciepła z jednorodnymi warunkami brzegowymi w układzie sferycznym o początku w środku sfery pole temperatury zależy tylko od promienia wodzącego  $r$  (Dodatek A). Przy takich założeniach skok temperatury w Eq.2.9, wynikający z oporu cieplnego Kapitzy  $\alpha$ , na granicy faz wtrącenia *inc* i matrycy *m* (Rys.C.1.a) jest następujący:

$$T_m - T_{inc} = -\alpha k_{inc} \left. \frac{\partial T_{inc}}{\partial r} \right|_{r=R} \rightarrow \alpha = - \frac{T_m - T_{inc}}{k_{inc} \left. \frac{\partial T_{inc}}{\partial r} \right|_{r=R}}. \quad (C.1)$$

W przypadku kompozytu trójfazowego z międzyfazą i perfekcyjnym połączeniem faz ( $\alpha = 0$ , Rys.C.1.b) jest zachowana ciągłość pola temperatury na granicach faz:

$$T_{inc} - T_{int} = 0 \quad \text{dla} \quad r=R \quad \wedge \quad T_{int} - T_m = 0 \quad \text{dla} \quad r=R+t. \quad (C.2)$$

Podstawiając do Eq.C.1 warunki ciągłości temperatury z Eq.C.2 otrzymujemy zależność między oporem cieplnym Kapitzy a międzyfazą w postaci:

$$\alpha = - \frac{T_{int}(R+t) - T_{int}(R)}{k_{inc} \left. \frac{\partial T_{inc}}{\partial r} \right|_{r=R}}. \quad (C.3)$$

Funkcję rozkładu temperatury w ośrodku jest zadana równaniem Eq.A.2. Różnica  $T_{int}(R+t) - T_{int}(R)$  wynosi zatem:

$$T_{int}(R+t) - T_{int}(R) = A_{int} t + B_{int} \left( \frac{1}{(R+t)^2} - \frac{1}{R^2} \right). \quad (C.4)$$

Korzystając z procedury wyznaczania stałych  $A_{int}$  i  $B_{int}$ , opisanej w dodatku A, zależność między oporem cieplnym Kapitzy na granicy faz kompozytu dwufazowego (Rys.C.1.a), a grubością międzyfazy  $t$  i współczynnikami przewodzenia ciepła faz kompozytu trójfazowego (Rys.C.1.b), wyraża się w formule:

$$\alpha = - \frac{t(3Rt(k_{inc} + k_{int}) + t^2(k_{inc} + 2k_{int}) + 3k_{inc}R^2)}{3k_{inc}k_{int}(R+t)^2}. \quad (C.5)$$

Jeżeli w Eq.C.4 zastosujemy następującą aproksymację:

$$\frac{1}{(R+t)^2} - \frac{1}{R^2} \cong -\frac{2t}{R^3}, \quad (C.6)$$

co jest dobrym przybliżeniem dla  $t \ll R$ , możemy uprościć Eq.C.5 do zależności:

$$\alpha = -\frac{t}{k_{int}}. \quad (C.7)$$

Aproksymacja C.6 została zaproponowana w pracy [111] dla zagadnienia sprężystości.

**Sprężystość.** W rozprawie doktorskiej niedoskonałe połączenie zaprezentowane na Rys.C.1.a w zagadnieniu sprężystości jest określone za pomocą liniowego modelu podatnego interfejsu (podrozdział 2.3.2). Na granicy między fazami pojawia się skok przemieszczeń, podczas gdy naprężenia muszą pozostać w równowadze (Eq.2.24). Aby skorzystać z algorytmu z dodatku B wszystkie fazy rozpatrujemy jako izotropowe. W zagadnieniu sprężystości osobno rozpatrujemy stan hydrostatyczny i dewiatorowy. Na Rys.C.1 zadajemy jednorodne warunki brzegowe odpowiednio hydrostatyczny stan odkształcenia lub czyste ścinanie [111]. W układzie sferycznym  $(r, \theta, \phi)$  o początku w środku sfery dla hydrostatycznego stanu odkształcenia, podobnie jak współczynnik przewodzenia ciepła, zagadnienie trójwymiarowe można sprowadzić do zagadnienia jednowymiarowego zależnego od promienia wodzącego  $r$  (Dodatek B). Przy takich założeniach skok przemieszczeń z Eq.2.24 zależy od składowej normalnej skoku przemieszczeń  $\eta$  liniowego modelu podatnego interfejsu na granicy faz wtrącenia *inc* i matrycy  $m$  na przykładzie Rys.C.1.a i jest następujący:

$$u_m^{(r)} = u_{inc}^{(r)} + \eta \sigma_{inc}^{(rr)} \quad \rightarrow \quad \eta = \frac{u_m^{(r)} - u_{inc}^{(r)}}{\sigma_{inc}^{(rr)}} \quad (C.8)$$

dla  $r = R$ ,  $u^{(r)}$  to składowa promieniowa wektora przemieszczenia. W przypadku kompozytu trójfazowego z międzyfazą i zerowym skokiem przemieszczeń promieniowych ( $\eta = 0$ ) na Rys.C.1.b na granicach faz  $R$  oraz  $R + t$  mamy równości:

$$u_{inc}^{(r)} - u_{int}^{(r)} = 0 \quad \text{dla } r = R \quad \wedge \quad u_{int}^{(r)} - u_m^{(r)} = 0 \quad \text{dla } r = R + t. \quad (C.9)$$

Podstawiając do Eq.C.8 warunki ciągłości  $u^{(r)}$  z Eq.C.9 otrzymujemy zależność między składową normalną liniowego modelu podatnego interfejsu a międzyfazą w postaci:

$$\eta = \frac{u_{int}^{(r)}(R + t) - u_{int}^{(r)}(R)}{\sigma_{inc}^{(rr)}}. \quad (C.10)$$

Funkcję rozkładu przemieszczeń  $u^{(r)}$  przyjęto zgodnie z Eq.B.3. Różnica  $u_{int}^{(r)}(R + t) - u_{int}^{(r)}(R)$  wynosi zatem:

$$u_{int}^{(r)}(R + t) - u_{int}^{(r)}(R) = A_{int} t + B_{int} \left( \frac{1}{(R + t)^2} - \frac{1}{R^2} \right), \quad (C.11)$$

analogicznie jak dla współczynnika przewodzenia ciepła z Eq.C.4. Przy wykorzystaniu procedury opisanej w dodatku B zależność między składową normalną liniowego modelu podatnego interfejsu  $\eta$  na granicy faz kompozytu dwufazowego (Rys.C.1.a), a grubością międzyfazy  $t$  oraz parametrami materiałowymi  $K$  i  $G$  faz kompozytu trójfazowego (Rys.C.1.b), ma postać:

$$\eta = \frac{t(R^2(4G_{int} + 9K_{inc} - 6K_{int}) + Rt(8G_{int} + 9K_{inc} - 3K_{int}) + t^2(4G_{int} + 3K_{inc}))}{3K_{inc}(R + t)^2(4G_{int} + 3K_{int})}. \quad (C.12)$$

Jeżeli zastosujemy aproksymację Eq.C.6 jak w pracy [111] w Eq.C.11 możemy uprościć Eq.C.12 do zależności:

$$\eta = \frac{9K_{inc}}{4G_{int} + 9K_{inc} - 6K_{int}} \cdot \frac{3t}{4G_{int} + 3K_{int}}, \quad (C.13)$$

którą przy założeniu  $K_{\text{inc}} \gg G_{\text{int}}$  i  $K_{\text{inc}} \gg K_{\text{int}}$  możemy uprościć do postaci [111]:

$$\eta = \frac{3t}{4G_{\text{int}} + 3K_{\text{int}}}. \quad (\text{C.14})$$

Procedura wyznaczenia zależności między składową styczną skoku przemieszczeń liniowego modelu podatnego interfejsu  $\mu$  a grubością międzyfazy  $t$  i parametrami materiałowymi  $K$  i  $G$  kompozytu trójfazowego dla stanu dewiatorowego jest analogiczna jak dla stanu hydrostatycznego. Ze względu na przyjętą funkcję przemieszczeń B.11 w procedurze zastosowano aproksymację jak w C.6 oraz dodatkowo:

$$\frac{1}{(R+t)^2} + \frac{1}{R^2} \cong \frac{2(R+t)}{R^2(R+2t)}. \quad (\text{C.15})$$

Zakładając  $G_{\text{inc}} \gg G_{\text{int}}$  oraz  $t \ll R$  możemy uprościć zależność  $\mu$  od  $t$  i parametrów materiałowych międzyfazy do postaci [111]:

$$\mu = \frac{t}{G_{\text{int}}}. \quad (\text{C.16})$$