

Новиков Т.А.

*Владимирский государственный университет имени Александра
Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых, г. Владимир, Российская
Федерация*

МИКРОМЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИТЫХ АЛЮМОМАТРИЧНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Аннотация. Выполнен анализ основных подходов к микромеханическому моделированию литых алюмоматричных композиционных материалов. Рассмотрены методы осреднения, конечно-элементные модели представительного элемента объема, расчеты по данным двумерной металлографии и трехмерной рентгеновской микротомографии, а также фазово-полевые модели разрушения. Основное внимание уделено способам описания упругопластического деформирования алюминиевой матрицы, хрупкого повреждения армирующих частиц, поведения межфазных границ и влияния литейной пористости. Обобщены результаты работ, в которых исследовано воздействие формы и взаимного расположения включений, межчастичных расстояний, кластеризации и остаточных термических напряжений на локализацию деформации и последовательность накопления повреждений. Показано, что расчет разрушения требует статистического задания прочности частиц и межфазных границ, а достоверность модели должна оцениваться не только по интегральной диаграмме деформирования, но и по данным металлографии, фрактографии, цифровой корреляции изображений и томографии.

Ключевые слова: алюмоматричные композиты; микромеханическое моделирование; представительный элемент объема; метод конечных элементов; межфазная граница; повреждение частиц; литейная пористость; остаточные напряжения

Abstract. The principal approaches to micromechanical modeling of cast aluminum matrix composites are reviewed. The analysis covers mean-field methods, finite element representative volume element models, simulations based on two-

dimensional metallographic images and three-dimensional X-ray microtomography data, and phase-field descriptions of fracture. Particular attention is given to the constitutive representation of the elastoplastic aluminum matrix, brittle damage of reinforcing particles, interfacial behavior, and casting porosity. Published results concerning the effects of particle shape and spatial arrangement, interparticle spacing, clustering, and residual thermal stresses on strain localization and damage accumulation are summarized. It is shown that fracture prediction requires a statistical description of particle and interface strength, whereas model validation should include not only macroscopic stress–strain curves but also metallographic, fractographic, digital image correlation, and tomography data.

Keywords: aluminum matrix composites; micromechanical modeling; representative volume element; finite element method; interfacial boundary; particle damage; casting porosity; residual stresses.

Литые алюмоматричные композиционные материалы относятся к гетерофазным системам. Их механические свойства определяются не только химическим составом и объемной долей армирующей фазы, но и геометрией включений, характером их распределения, состоянием межфазных границ, толщиной матричных прослоек и количеством литейных дефектов. Феноменологические модели макроуровня обычно воспроизводят усредненную диаграмму деформирования, однако не дают представления о том, где возникает локальная пластическая деформация и какой механизм определяет начало разрушения. Микромеханический подход позволяет явно либо статистически описать матрицу, армирующие частицы, межфазные границы и поры, а затем связать параметры микроструктуры с эффективными упругими характеристиками, пределом текучести, упрочнением, пластичностью и разрушением материала [1, 2].

Наиболее подробно исследованы системы Al–SiC, Al–Al₂O₃, Al–B₄C, Al–TiB₂ и Al–Mg₂Si. Сходные задачи возникают при моделировании литейных сплавов Al–Si, в которых первичные и эвтектические кристаллы кремния

рассматриваются как хрупкая фаза, распределенная в пластичной алюминиевой матрице. В отличие от композитов, полученных порошковыми методами, структура литого материала формируется в ходе течения и кристаллизации расплава. Поэтому средний размер частиц сам по себе не характеризует структуру в достаточной степени. Для расчета существенны угловатость и ориентация включений, наличие кластеров, связность эвтектических участков, расстояния между частицами, а также усадочная и газовая пористость. В эндогенно-армированных композитах дополнительно учитывают условия образования армирующей фазы в расплаве и особенности металлургического (адгезионного) контакта с матрицей.

Для первоначальной оценки эффективных свойств используют правило смесей, решения Эшелби, схему Мори–Танаки и самосогласованные методы. Такие модели удобны при расчете модуля упругости, коэффициента Пуассона и коэффициента линейного термического расширения, а также при анализе влияния объемной доли и свойств фаз. Включения при этом, как правило, заменяют сферами или эллипсоидами, а их взаимное влияние учитывают в осредненном виде. По этой причине методы осреднения дают приемлемые оценки интегральных характеристик, но малоприспособлены для определения мест разрушения частиц, отделения по межфазной границе и последующего развития трещины [1].

Основная часть современных микромеханических расчетов выполняется методом конечных элементов на представительном элементе объема (RVE, или ПЭО). В простейшем случае модель содержит одну частицу или регулярный набор частиц заданной формы. Стохастические ПЭО строят путем случайного размещения включений при заданных распределениях их размеров, ориентации и объемной доли. Более детальное описание получают после сегментации металлографических изображений. Трехмерные модели формируют по данным рентгеновской микротомографии; они воспроизводят пространственную геометрию включений, реальные межчастичные расстояния, внутренние поры и взаимное экранирование структурных

составляющих [1, 9]. Размер ПЭО следует выбирать по результатам проверки статистической и механической представительности. Обычно контролируют сходимость объемной доли фаз, распределений размеров и формы включений, эффективного модуля, предела текучести и деформации разрушения. Для стохастической литой структуры одного участка микрошлифа недостаточно: расчет целесообразно проводить для нескольких независимых реализаций и оценивать разброс полученных характеристик. При определении эффективных свойств преимущество имеют периодические граничные условия. Двумерные модели требуют значительно меньших вычислительных затрат, однако не воспроизводят пространственную связность фаз и в общем случае искажают трехмерное напряженное состояние. Расхождения между двумерной и трехмерной постановками особенно возрастают при ослабленном сцеплении частиц с матрицей [3].

На рис. 1 систематизирована последовательность построения микромеханической модели литого алюмоматричного композита. Исходными данными служат количественные характеристики микроструктуры: объемная доля, размеры, форма и пространственное распределение армирующих фаз, межчастичные расстояния, степень кластеризации, пористость и состояние межфазных границ. На этой основе формируют идеализированный, стохастический либо реконструированный по микрофотографиям или томографическим данным ПЭО.

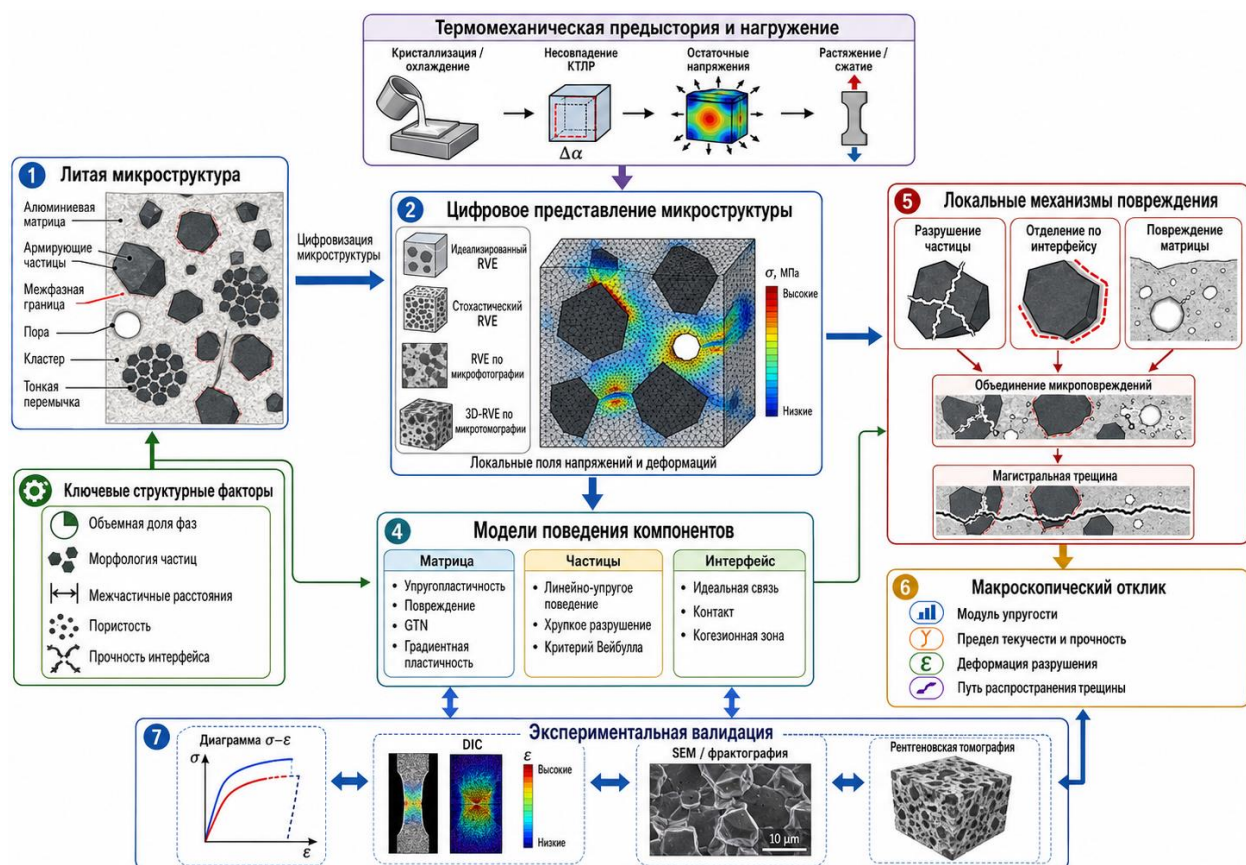


Рисунок 1 – Обобщенная схема микромеханического моделирования структуры, деформирования и разрушения литых алюмоматричных композиционных материалов

Самостоятельной частью расчета является воспроизведение термомеханической предыстории. Охлаждение после кристаллизации сопровождается образованием остаточных напряжений из-за различий коэффициентов термического расширения фаз. Сформированное при охлаждении состояние должно быть сохранено перед приложением механической нагрузки. В результате расчета получают поля напряжений и деформаций, по которым устанавливают последовательность конкурирующих механизмов: раскалывание частиц, отделение по межфазной границе, образование и рост микропустот в матрице, их объединение и формирование макротрещины. Переход от локального отклика к эффективным свойствам требует экспериментальной проверки по диаграммам деформирования, данным цифровой корреляции изображений, электронной фрактографии и рентгеновской микротомографии.

Основные подходы к микромеханическому моделированию литых алюмоматричных композитов приведены в табл. 1.

Таблица 1 — Основные подходы к микромеханическому моделированию литых алюмоматричных композиционных материалов

Подход	Представление микроструктуры	Основные возможности
Среднеполевой (методы осреднения)	Осредненные сферические или эллипсоидальные включения	Расчет эффективных упругих и термических характеристик
Идеализированный ПЭО (RVE)	Частицы заданной формы и положения	Анализ влияния размера, формы частиц и свойств межфазной границы
Стохастический ПЭО (RVE)	Случайная структура с заданными статистическими распределениями	Оценка роли кластеров, межчастичных расстояний и разброса свойств
ПЭО (RVE) по микрофотографии	Реальная двумерная морфология фаз и пор	Расчет локальных полей и мест зарождения повреждений
Томографический 3D-RVE	Пространственно реконструированные фазы и дефекты	Учет реальной геометрии, связности фаз и внутреннего повреждения
Фазово-полевой подход	Эволюционирующее поле повреждения в RVE	Описание произвольной траектории, ветвления и объединения трещин

Алюминиевую матрицу обычно описывают изотропной упругопластической моделью Мизеса с изотропным либо комбинированным упрочнением. Параметры такой модели следует определять по результатам испытаний неармированного матричного сплава или по локальным измерениям свойств матрицы. Использование макроскопической кривой композита одновременно для идентификации свойств матрицы и для проверки расчета приводит к некорректной калибровке и снижает прогностическую ценность модели. Разрушение матрицы описывают критической пластической деформацией, моделями Джонсона-Кука, соотношениями континуальной механики повреждений либо моделью пористого тела Гурсона-Твергаарда-

Нидлмана. Последняя представляет интерес для литых материалов, поскольку учитывает зарождение, рост и объединение пор при повышенной трехосности напряженного состояния. Ее параметры должны быть согласованы с измеренной пористостью и наблюдаемыми механизмами разрушения, а не подбираться только по общей кривой растяжения.

Классическая J_2 -пластичность не всегда отражает изменение прочности при уменьшении размера частиц и толщины межчастичных прослоек. Несовместимость деформации жесткой частицы и пластичной матрицы вызывает высокие градиенты пластической деформации и накопление геометрически необходимых дислокаций вблизи межфазной границы. Для учета связанного с этим упрочнения применяют градиентные теории пластичности. В работе [8] в единой постановке были описаны повреждение матрицы, отделение частиц и разрушение включений. Учет градиента деформации изменил распределение локальных напряжений и расчетную очередность повреждений по сравнению с классической теорией течения. Армирующие частицы карбидов, боридов, силицидов и т.п. чаще всего рассматривают как линейно-упругие хрупкие тела. Критерием разрушения служит достижение заданного главного напряжения, деформации или энергии разрушения. Одинаковое предельное значение для всех частиц приводит к их почти одновременному разрушению, что не соответствует реальной структуре. Частицы различаются по размерам, форме, ориентации и внутренней дефектности, поэтому более обоснованным является статистическое распределение прочности, например по закону Вейбулла. В этом случае первыми разрушаются наиболее крупные, угловатые или неблагоприятно ориентированные включения, после чего нагрузка перераспределяется на соседние участки матрицы и межфазной границы. Аналогичный подход может быть использован при задании межфазной прочности и размеров литейных пор.

Поведение на межфазной границе контакта матрица–частица задают условием идеального сцепления, контактным взаимодействием либо

когезионными элементами. Идеальная связь допустима как первое приближение для некоторых эндогенно-армированных материалов, но применительно к композитам с экзогенными частицами она нередко приводит к завышенной расчетной прочности. Когезионный закон связывает нормальные и касательные напряжения с раскрытием межфазной границы и содержит начальную жесткость, максимальную прочность и энергию разделения. При снижении межфазной прочности преобладающий механизм меняется: вместо пластического повреждения матрицы и раскалывания включений возникает раннее отделение частиц [4, 10]. Основная трудность состоит в независимом определении параметров когезионного закона. Для границы Al–SiC зависимость «напряжение - раскрытие» была получена методом молекулярной динамики и затем использована в конечно-элементной модели [4]. Такой подход дает возможность привести в соответствие атомистическое описание межфазной границы с расчетом на уровне микроструктуры.

Опубликованные в зарубежной печати расчетные данные показывают, что объемная доля армирующей фазы не может служить исчерпывающей характеристикой структуры. Скругление частиц снижает концентрацию напряжений, тогда как острые вершины, вытянутые ветви и тонкие алюминиевые прослойки создают локальные максимумы главных напряжений и пластической деформации. Кластеры формируют связанные зоны локализации и уменьшают расстояние, которое необходимо пройти трещине при объединении микрповреждений. В моделях, построенных по реальной микроструктуре, более равномерное распределение частиц по размерам и их менее угловатая форма обеспечивали более благоприятное сочетание прочности и пластичности. Ослабление межфазной границы, напротив, смещало начало повреждения из матрицы к контуру частиц [10]. Литейную пористость следует вводить в ПЭО в явном виде. Наиболее опасны поры, расположенные в матричных прослойках между близко расположенными частицами. В таких участках одновременно повышается трехосность

напряженного состояния и уменьшается площадь сечения, воспринимающего нагрузку [5, 9]. При построении модели важно сохранять не только суммарную объемную долю пор, но и распределение их размеров, форму и положение относительно армирующих включений.

Для литых эндогенно-армированных композитов системы Al–Mg₂Si решающее значение имеет реальная геометрия первичных многогранных кристаллов и разветвленных эвтектических образований Mg₂Si [12]. В расчетах по металлографическим изображениям увеличение содержания Mg₂Si сопровождалось ростом прочности и расширением областей локализации деформации, но одновременно снижало предельную деформацию [6]. При растяжении опасными участками становились острые вершины и тонкие ветви Mg₂Si, а также узкие алюминиевые прослойки между соседними выделениями. При сжатии разрушение Mg₂Si начиналось в суженных сечениях и вблизи углов частиц; в матрице при этом накапливались сдвиговые деформации у границ армирующей фазы. Сопоставление эксперимента и расчета в работе [7] показало, что повышение концентрации Mg₂Si увеличивает предел текучести и прочность при сжатии, однако ускоряет объединение хрупких повреждений и уменьшает деформацию до разрушения. Следовательно, замена реальных выделений круглыми включениями допустима при оценке эффективного модуля, но существенно искажает прогноз начала повреждения.

Полная постановка для литых композитов должна учитывать остаточные термические напряжения. Коэффициент линейного расширения алюминиевой матрицы обычно выше, чем у керамических и многих интерметаллидных фаз. При охлаждении матрица стремится сократиться сильнее, однако ее деформация ограничена частицами. В окрестности межфазной границы формируется самоуравновешенное напряженное состояние, которое частично релаксирует вследствие высокотемпературной пластичности алюминиевого сплава. Расчет нагружения из условно ненапряженного состояния может давать удовлетворительную оценку модуля,

но при этом неверно определять участки зарождения повреждений. Более корректна в данном случае последовательная термомеханическая постановка, включающая охлаждение с учетом температурной зависимости свойств фаз, сохранение остаточного состояния и последующее механическое нагружение.

Развитие микромеханического моделирования связано прежде всего с трехмерной реконструкцией реальной структуры и применением фазово-полевых методов разрушения. Томографические модели $\text{B}_4\text{C}_p/6061\text{Al}$ позволили непосредственно проследить влияние размеров частиц и микропор на возникновение внутреннего повреждения [9]. В отличие от моделей с заранее заданной траекторией, фазово-полевой подход описывает зарождение, ветвление и объединение трещин через эволюцию непрерывного поля повреждения. Это особенно важно при конкурирующих процессах разрушения матрицы, частиц и межфазных границ. В расчетах SiC_p/Al увеличение содержания SiC сопровождалось формированием связанных областей повышенных напряжений. При небольшой доле частиц трещина распространялась по извилистой траектории с заметным пластическим деформированием матрицы. При большей доле SiC повреждения быстрее объединялись по узким межчастичным прослойкам [11]. Практическое применение трехмерных и фазово-полевых моделей пока ограничивают значительные вычислительные затраты и сложность независимого определения параметров разрушения.

Таким образом, микромеханическая модель литого алюмоматричного композита должна воспроизводить статистически значимые особенности структуры и учитывать несколько конкурирующих механизмов повреждения. Для этого требуется ансамбль представительных элементов объема с реальной либо статистически эквивалентной морфологией армирующей фазы, модель упругопластического деформирования и повреждения матрицы, статистическое описание прочности хрупких включений, явное задание межфазной границы и пористости, а также предварительный расчет остаточного термического состояния. Проверка модели не должна сводиться

к совпадению расчетной и экспериментальной диаграмм «напряжение - деформация». Не менее важны сопоставление мест зарождения повреждений с металлографическими и фрактографическими наблюдениями, оценка доли разрушенных частиц, сравнение карт локальной деформации, полученных методом цифровой корреляции изображений, и, при наличии соответствующих данных, анализ трехмерной эволюции дефектов по результатам томографии. Такое сочетание расчетных и экспериментальных методов позволяет использовать микромеханическую модель не только для интерпретации уже полученных диаграмм, но и для обоснованного выбора состава, параметров микроструктуры и технологии получения литых алюмоматричных композиционных материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Li J., Wang F., Zhang C., Li Q., Chen T. A review of mesoscopic modeling and constitutive equations of particle-reinforced metals matrix composites based on finite element method. *Heliyon*. 2024. Vol. 10. Art. e26844. DOI: 10.1016/j.heliyon.2024.e26844.
2. Wu Q., Xu W., Zhang L. Microstructure-based modelling of fracture of particulate reinforced metal matrix composites. *Composites Part B: Engineering*. 2019. Vol. 163. P. 384–392. DOI: 10.1016/j.compositesb.2018.12.099.
3. Farkash A., Mittelman B., Hayun S., Priel E. Aluminum matrix composites with weak particle matrix interfaces: effective elastic properties investigated using micromechanical modeling. *Materials*. 2021. Vol. 14. Art. 6083. DOI: 10.3390/ma14206083.
4. Dandekar C.R., Shin Y.C. Molecular dynamics based cohesive zone law for describing Al–SiC interface mechanics. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2011. Vol. 42. P. 355–363. DOI: 10.1016/j.compositesa.2010.12.005.

5. Rivera-Salinas J.E. et al. Simulation on the effect of porosity in the elastic modulus of SiC particle reinforced Al matrix composites. *Metals*. 2020. Vol. 10. Art. 391. DOI: 10.3390/met10030391.
6. Biswas P., Mandal D., Mondal M.K. Failures analysis of in-situ Al–Mg₂Si composites using actual microstructure based model. *Materials Science and Engineering A*. 2020. Vol. 797. Art. 140155. DOI: 10.1016/j.msea.2020.140155.
7. Biswas P. et al. Compressive failure analysis of in-situ Al–Mg₂Si composites: experiment and finite element modelling. *Engineering Fracture Mechanics*. 2023. Vol. 277. Art. 108986. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2022.108986.
8. Wu H., Xu W., Shan D., Wang X., Guo B., Jin B.C. Micromechanical modeling of damage evolution and fracture behavior in particle reinforced metal matrix composites based on the conventional theory of mechanism-based strain gradient plasticity. *Journal of Materials Research and Technology*. 2023. Vol. 22. P. 625–641. DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.11.139.
9. Peng P., Gao M., Guo E., Kang H., Xie H., Chen Z., Wang T. Deformation behavior and damage in B₄C_p/6061Al composites: an actual 3D microstructure-based modeling. *Materials Science and Engineering A*. 2020. Vol. 781. Art. 139169. DOI: 10.1016/j.msea.2020.139169.
10. Yan Y.F., Kou S.Q., Yang H.Y., Shu S.L., Shi F.J., Qiu F., Jiang Q.C. Microstructure-based simulation on the mechanical behavior of particle reinforced metal matrix composites with varying particle characteristics. *Journal of Materials Research and Technology*. 2023. DOI: 10.1016/j.jmrt.2023.08.123.
11. Xiao Y., Peng X., Wang D., Luo Y., Sun X., Lin K., Ye J. Phase-field simulation study on the mechanical behavior and fracture mechanism of SiC_p/Al composites considering microstructural effects under uniaxial tension. *Composites Communications*. 2025. Vol. 58. Art. 102540. DOI: 10.1016/j.coco.2025.102540.

12. Deev V.B., Prusov E.S., Ri E.H. Microstructural modification of in-situ aluminum matrix composites via pulsed electromagnetic processing of crystallizing melt. *Non-Ferrous Metals*. 2023. No. 1. P. 36-40.