

DOKTORI ÉRTEKEZÉS

Kenesei Péter

2009

DOKTORI ÉRTEKEZÉS

Szemcseerősítésű fémmátrixú kompozitok szerkezeti és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata és modellezése

Szerző:

Kenesei Péter

Témavezetők:

Dr. Habil. Borbély András Ph.D, egyetemi docens, Anyagfizikai Tanszék

Dr. Lendvai János D.Sc, egyetemi tanár, Anyagfizikai Tanszék



Eötvös Loránd Tudományegyetem

Fizika Doktori Iskola

Anyagtudomány és Szilárdtestfizika Program

Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán MHAS, egyetemi tanár, Elméleti Fizika Tanszék

Programvezető: Dr. Lendvai János D.Sc, egyetemi tanár, Fizikai Intézet

Kutatóhely: Eötvös Loránd Tudományegyetem, Fizikai Intézet, Anyagfizikai Tanszék

Tanszékvezető: Dr. Lendvai János D.Sc, egyetemi tanár

Tartalomjegyzék

1	Bevezetés.....	1
1.1	Kompozitok tulajdonságai, általános jellemzésük	2
1.1.1	Kompozitok osztályozásai.....	2
1.1.2	Kompozitok fizikai tulajdonságai	4
1.1.3	Kompozitok alkalmazási területei.....	6
1.2	Az általunk vizsgált kompozit alkotói.....	9
1.3	A fémmátrixú kompozitok effektív fizikai tulajdonságait befolyásoló hatások	9
1.4	A kutatás célja	11
2	Irodalmi áttekintés.....	13
2.1	Kontinuummechanikai bevezetés.....	13
2.1.1	Kontinuummechanikai alapok.....	13
2.1.2	Anyagmodellek	15
2.1.2.1	Rugalmas alakítás.....	15
2.1.2.2	Képlékeny alakítás	17
2.2	Anyagok mikroszerkezetének elméleti leírása	20
2.2.1	Részecskealak jellemzése.....	20
2.2.2	Korrelációs együttható	21
2.2.3	Részecsketávolságok eloszlása, egyenesúthossz-függvény	22
2.2.4	Korrelációs függvények: n-pont-valószínűségi függvények.....	22
2.2.5	A térfogati hányad variabilitása	25
2.3	Kompozitok rugalmas tulajdonságainak általános elméleti leírása.....	27
2.3.1	Az első közelítések: Voigt- és Reuss-féle rugalmassági határok	27
2.3.2	Hashin–Shtrikman-határok.....	28
2.3.3	Háromponthatárok.....	30
2.3.4	Anizotróp határok.....	32
2.4	A reprezentatív térfogatelem meghatározása	35
2.4.1	A reprezentatív térfogatelem minimális méretének kvantitatív becslése.....	36
2.4.2	Az általunk vizsgált kompozitra vonatkozó Drugan–Willis-becslések.....	38
2.4.3	Numerikus módszerekkel történő becslések	38
2.5	Kompozitok alakítási tulajdonságainak leírása.....	39
3	A végeselem módszer.....	42
3.1	A módszer elve.....	42
3.1.1	Diszkrétizáció.....	42
3.1.2	Variációs elvek a végeselem módszerhez	43
3.1.3	Interpolációs függvények, normált koordináták.....	45
3.1.4	Numerikus integrálás.....	46
3.1.5	Hibaforrások, szuperkonvergens pontok.....	46
3.1.6	Megújítás, SPR, REP, a megoldás hibája	47
3.1.7	Szimmetriák szerepe, határfeltételek.....	50
3.1.8	Képlékeny alakítás kezelése, nemlineáris megoldás.....	50
3.2	A módszer megvalósítása az MSC.Marc/Mentat programmal	51
4	Háromdimenziós szerkezetmeghatározás	54
4.1	A tomográfia elve.....	54
4.2	A fáziskontraszt-tomográfia elve	55
4.3	A holotomográfia elve.....	59
5	Szerkezetiértékelés a holotomografikus rekonstrukció alapján	61
5.1	Elsődleges szerkezetanalízis	61
5.2	Kibővített szerkezetanalízis [S1]–[S5].....	63
5.2.1	Részecskeméret, részecskekarcsúság	63
5.2.2	Részecskeorientáció	65
5.2.3	Alakfaktor.....	65

5.2.4	Lokális térfogatok	66
5.2.4.1	A lokális térfogatok meghatározása	66
5.2.4.2	A lokális térfogatok térfogati hányadának eloszlása	66
5.2.4.3	A lokális térfogatok karcsúsága	67
5.2.4.4	A részecskék lokális excentricitása	68
5.2.5	Párkorrelációs függvények	69
5.2.6	Hárompont-valószínűségi függvények	73
5.2.7	A lokális változatosság, szerkezeti durvaság	74
5.2.8	Összefoglalás a szerkezeti adatokról	75
6	Modellezés végelemmódszerrel	77
6.1	A végelemmodellek általános felépítése	78
6.2	Technikai információk	79
6.3	Statisztikus (átlagolási) módszerek	80
6.3.1	Az átlagolásiablak-módszer [S1]	81
6.3.1.1	A módszer elve	81
6.3.1.2	A módszer megvalósítása végelemmodellel	82
6.3.1.3	A kapott eredmények	83
6.3.1.4	Rugalmas tulajdonságok	84
6.3.1.5	Képlékeny tulajdonságok	85
6.3.1.6	A módszer alkalmazhatósága	87
6.3.2	Egységcellamodellek [S2], [S3]	88
6.3.2.1	A módszer elve	88
6.3.2.2	A módszer javításai	89
6.3.2.3	A modellek megvalósítása	90
6.3.2.4	A modellek összegzése	91
6.3.2.5	Rugalmas tulajdonságok	92
6.3.2.6	Képlékeny tulajdonságok	93
6.3.2.7	A módszer alkalmazhatósága	95
6.3.3	Multiskálamodellek [S2], [S3]	96
6.3.3.1	A módszer elve	96
6.3.3.2	A modellek megvalósítása	97
6.3.3.3	Rugalmas tulajdonságok	98
6.3.3.4	Képlékeny tulajdonságok	98
6.3.3.5	A módszer további javítása	100
6.3.3.6	A módszer alkalmazhatósága	105
6.3.4	Konklúziók a mikroszerkezeti statisztikán alapuló módszerekre vonatkozóan	106
6.4	Közvetlen módszerek (többrészecskés modellek)	108
6.4.1	Rugalmas tulajdonságok vizsgálata közvetlen modelleken [S4]	108
6.4.1.1	Rugalmas tulajdonságok becslése a mikroszerkezeti paraméterek alapján	108
6.4.1.2	A módszer elve	110
6.4.1.3	A közvetlen modellek megvalósítása	111
6.4.1.4	Rugalmas tulajdonságok	112
6.4.1.5	A módszer alkalmazhatósága	117
6.4.2	Az átlagablakmódszer [S5]	117
6.4.2.1	A módszer elve	117
6.4.2.2	A módszer megvalósítása	119
6.4.2.3	Rugalmas tulajdonságok	119
6.4.2.4	Képlékeny tulajdonságok	121
6.4.2.5	A módszer alkalmazhatósága	122
6.4.3	Konklúziók a közvetlen módszerekre vonatkozóan	124
7	Összefoglalás	126
8	Köszönetnyilvánítás	129
9	Függelék	130

9.1	Variációs elvek és rugalmassági határok	130
9.1.1	A Hashin-Shtrikman-féle variációs elvek	130
9.1.2	A Walpole-féle megközelítés	131
9.1.3	A Willis-féle határok	135
9.2	Az átlagablak és az átlagos tulajdonság kapcsolata	137
10	Az értekezés alapjául szolgáló közlemények	138
11	Irodalomjegyzék	139
12	Összefoglaló	146
13	Summary	147

1 Bevezetés

A fémmátrixú kompozitok az utóbbi évtizedben kerültek igazán a kutatás és az ipari érdeklődés homlokterébe annak ellenére, hogy már az 1960-as években voltak próbálkozások az előállításukra, de csak az 1980-as években kezdődtek az első kutatás-fejlesztési programok [1]. Először Japán kezdett komoly technológiai fejlesztésekbe állami, ipari és akadémiai összefogással. Ezután az Egyesült Államok védelmi és repülési programjai karolták fel és támogatták jelentősen a fémmátrixú kompozitok kutatását, és tűztek ki államilag támogatott kutatási ösztöndíjakat, pályázatokat. Valamivel később kezdődtek el Európában a kutatási programok mind az egyes nemzetek, mind a Közösség szintjén.

A fémmátrixú kompozitok kutatása révén kifejlesztett technológiák már elég jó minőségű anyagokat tudtak produkálni, hogy az ipar komolyan felfigyeljen rájuk. Rendkívül hasznosnak bizonyuló tulajdonságaikra derült fény, amelyek versenybe állították őket a konvencionális ötvözetekkel. Szakfőtisztaságuk, terhelhetőségük lényegesen nagyobb, mint az ötvözeteké, alig megnövekedett sűrűség mellett, de végeredményben a termék súlycsökkentését téve lehetővé. Ugyanakkor magasabb hőmérsékleteken is alkalmasak maradnak a mechanikai szerepük betöltésére, amikor már a konvencionális ötvözetek nem használhatók. További nagy előnyük, hogy egyedi célokra speciálisan, az alkalmazás igényének megfelelően beállíthatóak a tulajdonságaik, például anyaguk, összetételük vagy szerkezetük céltudatos megválasztásával.

Vizonylag magas előállítási költségük miatt főként speciális területeken alkalmazzák ezeket az anyagokat, mint például a repülőgépiparban vagy az űrtechnikában, de lassanként mindennaposak lesznek a gépkocsigyártásban is [2]. Mindazonáltal még korántsem ismertek teljes részleteiben a mechanikai terhelés, deformáció hatására várható anyagi folyamatok, nem lehet elegendően pontos becsléseket adni egy valóságban előforduló részecskeerosztású fémmátrixú kompozit rugalmas és képlékeny tulajdonságaira.

Jelen értekezésben azt tárgyaljuk, hogy valódi kompozitokon kivitelezett háromdimenziós szerkezetvizsgálatok alapján hogyan lehet fizikai modelleket építeni, és e számítógépes modellek alapján hogyan lehet a mechanikai tulajdonságokra becslést adni.

Ebben a fejezetben a kompozitok rövid, általános jellemzése után az általunk vizsgált kompozit tulajdonságait ismertetjük, majd a felmerülő kérdések alapján megjelöljük az értekezésben tárgyalt kutatási téma céljait.

A bevezetés után irodalmi áttekintést adunk a téma fizikai alapjairól és elméleti megközelítéséről, valamint a heterogén anyagok tudományában használatos szerkezetleírási lehetőségekről. Ezután a modellezéshez használt végelelem módszer elvi alapjait és módszerének elvét ismertetjük röviden az elengedhetetlenül szükséges számítási lépések felvázolására korlátozódva. Mivel a végelelemmodell valódi kompoziton alapuló felépítését a modern,

szinkrotronsugárzást felhasználó háromdimenziós tomografikus mérések tették lehetővé, ezért röviden kitérünk a mérési módszer alapjaira.

Saját eredményeink kifejtését azzal kezdjük, hogy a tomografikus mérések eredményeiből kinyerhető, a valódi szerkezetet jellemző statisztikus tulajdonságokat elemezzük, majd ezután térünk rá arra, hogy a birtokunkba jutott szerkezeti információk alapján — ismerve a számítási korlátokat —, mely modellezési stratégiák mentén, milyen konkrét, kivitelezhető mechanikai modelleket lehet felépíteni, és ezek milyen eredményt szolgáltatnak. A kapott eredményeket összehasonlítjuk egymással, amennyiben lehetséges az elméleti jóslatokkal is, valamint a valódi anyagon mért paraméterekkel, és végül levonjuk következtetéseinket.

1.1 Kompozitok tulajdonságai, általános jellemzésük

Általánosságban kompozitnak tekintjük azokat az anyagokat, amelyek legalább két különböző összetevő kombinációjából állnak, amelyek határfelületük mentén kötődnek egymáshoz. A két összetevő eltérhet anyagában, tulajdonságaiban és/vagy szerkezetében egymástól. Fontos megjegyezni, hogy az összetevőknek a gyártás előtt is elkülönülten léteznie kell, így különböztetjük meg a tömbi eljárásokkal, fázisátalakulás révén előállított többfázisú anyagoktól, például a többfázisú ötvözetektől, vagy a kerámiakiválásokat tartalmazó ötvözetektől, bár ezeket szokás „in-situ kompozitoknak” is nevezni.

1.1.1 Kompozitok osztályozásai

Az anyagok kombinálásának célja a komponensanyagok előnyös tulajdonságainak kiemelése, illetve hátrányos tulajdonságaiknak kiküszöbölése. Tipikusan egy folytonos fázisú alpanyagba, az úgynevezett mátrixba egy vagy több „erősebb” fázist visznek be, ezért ezeket az összetevőket erősítőfázisnak nevezik. Azonban ritkábban az is előfordul, hogy ezekkel a fázisokkal csökkentik a kompozit merevségét vagy ridegségét, ekkor gyengítőfázisról beszélünk.

A mátrix anyaga alapján szokás elsődlegesen kategorizálni a kompozitokat [1], [2]. Megkülönböztetünk polimer-, kerámia- és fémmátrixú kompozitokat. Az erősítőfázis is lehet azonban összefüggő, ekkor nem egyértelmű, hogy melyik anyagot tekintik mátrixnak, az elterjedtebb elnevezés marad fenn. Itt jegyezzük meg, hogy ha az imént említett mátrixanyagok mellett a másik összetevő gáz, akkor polimer-, kerámia-, illetve fémhabról beszélünk, összefoglalóan pedig celluláris anyagoknak nevezzük. Egyes irodalmak kompozitként kezelik ezeket az anyagokat is, egyesek pedig a két fázis egyértelmű összekapcsolódásának hiányára hivatkozva elkülönítik a kompozitoktól. A gáz fázis lehet zárt cellákban, illetve összefüggő üreghalmazt alkotó nyitott cellákban is.

Gyakori továbbá az erősítőfázis morfológiáján alapuló osztályozás is [1], [2]. Léteznek kisebb-nagyobb anyagi részecskéket, rövidebb-hosszabb szálakat/rostokat, esetleg folytonos szálakat/rostokat, vagy lemezeket tartalmazó mátrixok. Olykor ezek kombinációját is alkalmazzák,

például a keresztaszál vagy szöveterősítéssel kompozitoknál. Az erősítőfázis méretei szerint is alkalmaznak megkülönböztető elnevezéseket. Folytonos erősítőfázisnak nevezik a legalább egyik kiterjedésében a kompoziton keresztül folytonosan áthaladó fázist (pl. folytonos rostok vagy nyitott cellás fémháló). Az úgynevezett monoszál kompozitokban többnyire 100 µm átmérőnél vastagabb szálak (általában szén- vagy volfrámszála depozícióval növesztett szálak) vannak, amelyek nem fonottak. A folytonos rostos kompozitokban általában egyenként 3-30 µm átmérőjű szálakból font rostok alkotják az erősítőfázist. Másik csoportot képeznek a nem folytonos erősítéssel rendelkező kompozitok, amelyek tartalmazhatnak részecskéket, rövid rostokat vagy úgynevezett viszkereket^{*}. A részecskék nagyjából egyforma méretű, konvencionálisan 5-nél kisebb hosszúság-átmérő arányú kompozitalkotók. Lehetnek akár gömbölyű, szögletes vagy lemezkeszerű formájúak, átmérőjük többnyire 1 µm-nél nagyobb. Ha a méretük 1 µm alatti, akkor diszperzoidokról beszélünk, amelyek főként az Orován-mechanizmus [3] révén érnek el erősítő hatást. A lapos formájú, 2-nél nagyobb átmérő-vastagság aránnyal rendelkező részecskéket lemezeknek nevezzük, ha ez az arány 5 alatt marad, azonban ha 5 fölötti, akkor már nem tekintjük részecskének.

Ha az erősítőfázis henger alakú, a hosszúság-átmérő aránya (karcsúsága) 5-nél nagyobb, valamint az átmérője 1 µm fölé esik, akkor rövid rostokról beszélünk. A gyakorlatban azonban tipikusan 100 fölötti ez az arány. Viszkereknek nevezzük az olyan hosszúságú egykristályokat, amelyek hosszúság-átmérő aránya 10 fölötti, és átmérőjük 1 µm alatti.

Az általunk is vizsgált kompozitokat szemcseerősítésű vagy részecskeerősítésű fémmátrixú kompozitoknak nevezik, amennyiben az erősítőfázis térfogati hányada meghaladja az 5%-ot. Az angol elnevezés sem egységes: particulate (vagy particle) reinforced metal-matrix composites. (A továbbiakban az egyértelműség kedvéért a polikristályos fémek szemcséitől megkülönböztetve részecskéként hivatkozunk az erősítőfázisra.) A gyakran használt rövidítések az angol elnevezésekből fémmátrixú kompozitokra MMC[†], a részecskeerősítésű kompozitokra PRM[‡] vagy PMMC. A rövid rosttal, viszkerrel, folytonos rosttal, illetve monoszállal erősített fémmátrixú kompozitokat rendre SFRM[§], WRM^{**}, CFRM^{††}, MFRM^{‡‡} rövidítéssel jelölik. A polimer- vagy műanyagmátrixú kompozitoknál is hasonló elnevezéseket találunk, a leggyakoribbak a szénszálerősítésű polimerek (CFRP^{§§} vagy GFRP^{***}), illetve az üvegszál erősítésű műanyagok (GRP^{†††} vagy GFRP^{*}). Az összefüggő kerámiafázist és fémmátrixot

^{*} Az angol whisker szóból

[†] Metal-matrix composites

[‡] Particulate reinforced metal-matrix composites

[§] Short fiber reinforced metal-matrix composites

^{**} Whisker reinforced metal-matrix composites

^{††} Continuous fiber reinforced metal-matrix composites

^{‡‡} Monofilament reinforced metal-matrix composites

^{§§} Carbon fiber reinforced polymer

^{***} Graphite fiber reinforced polymer

^{†††} Glass reinforced plastic

tartalmazó kompozitokat cermetnek (a ceramic + metallic angol szavak összekapcsolásából) nevezik, amelyekben a fém térfogati hányada akár 20% alatti is lehet.

A fenti tömören leírt osztályozás is mutatja, hogy rengeteg anyagi és szerkezeti kombinációjú kompozitot fejlesztettek ki elsősorban az ipar igényeinek kielégítésére [4]. Ezen kompozitok előállítási módszerei is igen sokfélék, ezért itt nem részletezzük, csak felsoroljuk őket, és a szakirodalomra utalunk (pl. [1], [4]). Az általunk használt kompozit előállítását írjuk csak le részletesebben fizikai tulajdonságainak bemutatásakor (1.2 fejezet).

A fémmátrixú kompozitok készítésekor a már előkészített erősítőfázis (kerámiarészecskék, szálak) és fém összetevő kompozittá munkálható keverés közbeni öntéssel, infiltrációs eljárásokkal (spontán, nyomás alatti, vákuumos, centrifugális, ultrahangos, elektromágneses), porlasztásos öntéssel, folyadékfázisú szintereléssel, szilárdfázisú szintereléssel, meleg izosztatikus összenomással, sajtolással, hengerléssel. Az így kapott kompozitanyagot általában további megmunkálásnak (sajtolás, hengerlés, kovácsolás, hőkezelések) vetik alá, hogy a kívánt alakú, és mikroszerkezetű munkadarabhoz jussanak, ugyanakkor ezekkel az eljárásokkal a végtermék porozitását is jelentősen csökkenthetik.

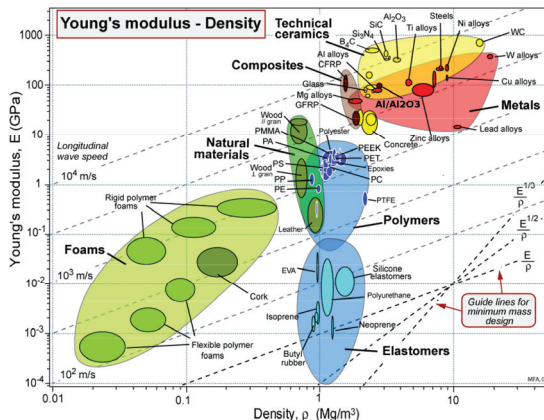
1.1.2 Kompozitok fizikai tulajdonságai

A kompozitok mechanikai, hőtani és elektromos tulajdonságai tartoznak a jelenlegi kutatások homlokterébe. Ebben az értekezésben a fémmátrixú kompozitok mechanikai tulajdonságait helyezzük előtérbe, azonban — az alkalmazási lehetőségek széleskörűségét alátámasztandó — röviden kitérünk más tulajdonságokra is.

A fémmátrixú kompozitok előnyös fizikai tulajdonságait legjobban más anyagokkal történő összehasonlításukkal lehet illusztrálni, ezt célszerű a mérnöki tervezési gyakorlatban gyakran használt, úgynevezett Ashby-féle anyagkiválasztási térképek [5] alapján megtenni. Az 1.1. ábra alapján például a rugalmas alakítást jellemző Young-modulus és a sűrűség szerint különféle alkalmazási célokat jellemző anyagi indexek figyelembevételével lehet grafikusán mintegy sorba rendezni az anyagcsoportokat. Ezeken az ábrákon egyszerre két fizikai tulajdonság szerint lehet az alkalmazáshoz jól illeszkedő anyagot kiválasztani. Az 1.1. ábrán csak az üvegszál- és szénszál-erősítésű kompozitok tulajdonságai alapján jelenik meg a kompozitok csoportja. A fémmátrixú kompozitok közelítőleg a kerámiák és fémek csoportját együttesen fedik le. Az általunk vizsgált fémmátrixú kompozit a fémek és a kerámiák által közösen lefedett narancssárga területen található, és Al/Al₂O₃ felirattal jelöltük. A mérnöki gyakorlatban az anyagok erősségét a szakításhoz szükséges terheléssel jellemzik, ezt az 1.2. ábrán a függőleges tengelyen tüntettük fel a sűrűség szerint. Általánosságban elmondható, hogy a kerámiák és a fémek a legerősebb és egyben legmerevebb anyagaink, tehát nagy szilárdságú szerkezeti elemekhez ideális alapanyagok. Azonban a kerámiák ridegsége és a fémek jól szabályozható képlékenysége kedvezően társítható a

* Glass fiber reinforced plastic

kompozitokban, tovább növelve a mechanikai szilárdságot, mégpedig elsősorban az alkotók térfogati hányada szerint. Azonban a kompozitok belső szerkezete is jelentősen befolyásolja az anyag makroszkopikus viselkedését a mikroszerkezet hatásai révén. Az anyag makroszkopikus viselkedésének a mikroszerkezettől való függése jelenleg sem tisztázott minden részletében.



1.1. ábra — Ashby-féle térkép az anyagok mechanikai tulajdonság szerinti kiválasztásához Young-modulusuk és sűrűségük alapján. A feltüntetett vezérvonalak (E/ρ , $E^{1/2}/\rho^{1/2}$, $E^{1/3}/\rho^{1/3}$) a tervezési optimalizációhoz használhatók [5], [6].

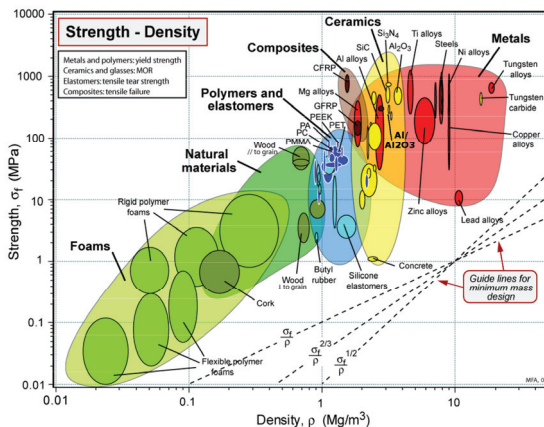
A tudományos és mérnöki érdeklődés egyik fontos részét képezi az anyagkárosodás vizsgálata, azaz a terhelés, igénybevétel, fárasztás hatása a mechanikai tulajdonságokra, mivel az alkalmazásokban ez szab határt a mérnöki tervezésnek. Ebben az értekezésben kizárólag a károsodás nélküli anyag mechanikai tulajdonságait fogjuk elemezni.

A kompozitok esetében fontos még kiemelni a hangolható makroszkopikus hőtágulást, hővezetést, hődiffuzivitást, amely a hőtani alkalmazások miatt lett fontos kutatási terület. A kerámiák viszonylag jó hővezetők, így jó hőelvezető kompozitelemeket lehet gyártani belőlük, amelyek hőtágulása megegyezik a hűtendő felületével. Ha esetleg súrlódás folytán melegednek, akkor még a kopásállóságuk is fontos szempont lehet a tervezésben.

* Ez az anyagi index kötőgerenda esetén, amelyet a minimális tömre optimalizálnak adott hosszúság és nyújtási szilárdság esetén. Minél nagyobb ez az anyagi index, annál kisebb tömegű kötőgerenda elegendő egy adott alkalmazásban.

† Ezt az anyagi indexet használják lehajlásra igénybevett négyzetes keresztmetszetű gerendák esetén, amelyeket minimális tömre optimalizálnak adott hajlítási merevség (terhelés/behajlás) és áthidaló hosszúság esetén.

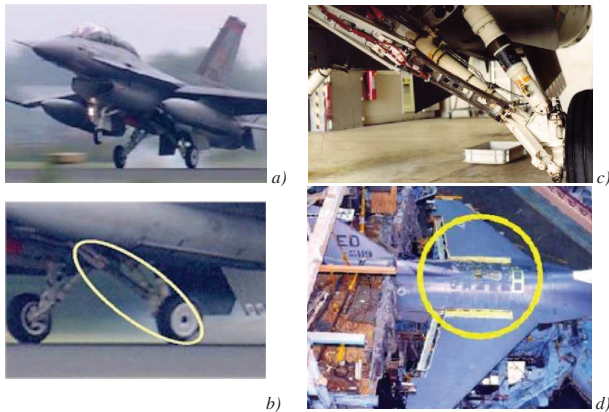
‡ Ha a lehajlásra igénybevett adott hosszúságú gerenda, nem négyzetes keresztmetszetű, hanem adott szélességű, azaz csak a vastagsága szerint lehet az optimalizálást végezni (például egy fődémlemez esetén), akkor ezt az anyagi indexet kell maximalizálni.



1.2. ábra — Ashby-térkép az anyagok erőssége (szakítószilárdság, folyáshatár) és sűrűsége alapján az 1.1. ábrán feltüntetett anyagokra [5], [6].

1.1.3 Kompozitok alkalmazási területei

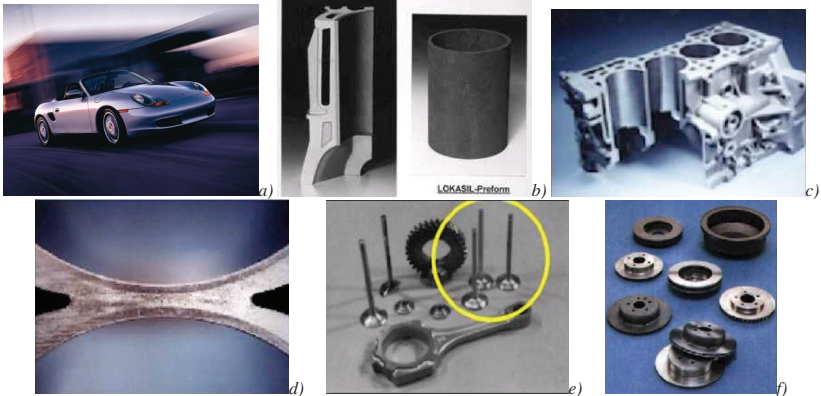
A kompozit anyagok alkalmazhatóságát fizikai tulajdonságaik határozzák meg, amelyek igen széles tartományban változtathatók, így az adott speciális alkalmazásra optimalizálhatók. A kompozit anyagok sokféleségét az alkalmazási területek sokrétűsége igényelte, és a számos előállítási módszer tette lehetővé. Mivel az előállításuk viszonylag drága, ezért főként egyedi igényeket kielégítő alkatrészekhez használják. Elsődlegesen kis fajsúlyuk mellett nyújtott különleges mechanikai tulajdonságaik révén az űrrepülésben, a hadiiparban és a repülőgépgyártásban használtak ilyen anyagokat (1.3. ábra), majd a vasúti jármű-gyártásban (1.4. ábra) és a gépkocsigyártásban (1.5. ábra) is előtérbe kerültek. Az energia- és anyagtakarékosság szem előtt tartásával igyekeztek súlycsökkentő fejlesztéseket kivitelezni a kritikus területeken. Kedvezően hangolható hőtágulási és hővezetési tulajdonságaik miatt az elektronikai iparban is népszerűek lettek (1.6a ábra), és nem utolsósorban a sportszergyártásban is előtértek (1.6c ábra). Az ábrákon konkrét alkalmazási példákat mutatunk be, a technikai részleteket az ábraszövegekben adtuk meg.



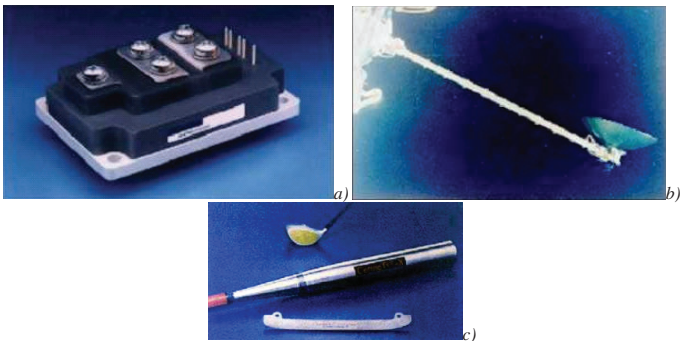
1.3. ábra — F-16-os vadászpilóta repülőgép leszálláskor (a), a futóművének (b) alsó merevítő karja (c) szénmagos SiC száalakkal erősített Ti-6Al-4Sn-2Zr-4Mo (Ti-6424) mátrixú kompozitból készült. A SiC monoszálakra plazmaszórt Ti ötvözetet szalagokat készítettek, amelyeket meleg izosztatikus összenyomással (HIP) kompaktáltak. Ez az anyag 40%-os súlymegtakarítást jelent az eredetileg alkalmazott acélalkatrészhez képest. A repülés közbeni üzemanyagotöltő nyílás fedőlemeze (d) AA6092-T6 ötvözetből és 17.5% térfogati hányadban SiC kerámiarészecskékből áll, és 8% nyújtást bír ki (DWA Al Composites, Inc.) [1]. A korábban használt AA2024 ötvözet nem bizonyult elegendően tartósnak, gyakori meghibásodásokat, töréseket okozott. Ugyanez az eset állt fenn az alsó vezérsík esetében, amely gyakran letört a rendkívül erős aerodinamikai terhelés miatt, az említett ötvözetet a fémmátrixú kompozitúra cserélve a felületen jelentkező maximális feszültség mintegy 38%-kal csökkent, ezzel a probléma megoldódott [2].



1.4. ábra — Az ICE gyorsvonatok (a)(b) normál üzemben 300 km/h sebességgel száguldanak. Az ICE2 gyorsvonat AISi7Mg ötvözet alapú SiC részecskéket tartalmazó fémmátrixú kompozitból készült fékrotorjai (c) segítségével lehet megállítani a súlyos szerelvényt (az anyagot a Duralcan gyártja). Egy öntöttvasból készült fékrotor 140 kg tömegű rugózatlan tömeget jelent, míg a kompozit alkatrész már csak 76 kg, így az egy vagonon lévő 8 fékrotoron már jelentős tömegcsökkentést lehet elérni. Ilyen úgynevezett sűrűláda kompozitokat gyártanak mind fémmátrixú, mind kerámiamátrixú kompozitokból, és fő alkalmazási területük a könnyű és nagyon hosszú élettartamú fekerendezések fejlesztése. [2], [7], [8]



1.5. ábra — A Porsche Boxter (a) motorblokkjában LOKASIL technikával előállított AlSi9Cu3 mátrixú 25%-ban SiC részecskéket tartalmazó hengerbélést alakítanak ki (b), ezzel nem csak a motor kopását lehet csökkenteni, hanem a dugattyú sűrűlődsát is. A Honda Prelude alumínium motorblokkjában (c) a hengerek belső felülete (d) integrált öntéstechnikával 12% Al_2O_3 -ot tartalmaz a kopásállóság miatt és 9% grafitot a csúszás biztosításához, az öntöttvashoz jelentős súlycsökkenés mellett a hűtési tulajdonságok is javultak. A Toyota Altezza kipufogószelei (e) Ti ötvözet alapú kompozitból készültek, így nem csak a kopást, hanem a magas hőmérsékletet is jobban viseli. Egyes gépkocsik (pl. Plymouth Prowler, Volkswagen-eco-Lupo, Lotus Elise) fékdobjai és féktárcsái (f) is gyakran készülnek már fémmátrixú kompozitokból (pl. A359 és AlSiMg ötvözet 20% SiC részecskékkel), amelyek nagy kopásállóságúak, kiváló hődisszipativitásúak, kis tömegűek és korrózióállóak. [2]



1.6. ábra — AlSi ötvözet alapú 20-70%-ban SiC-ot tartalmazó kompozitot (a) használnak kommunikációs műholdakban a teljesítményfelvezető hordozójaként, mikrohullámú eszközökben hővezető burkolatként, ezzel illeszkedik a kerámia alapleméhez. Ezek a kompozitok jó hővezetők, és hőtágulási együtthatójuk hangolható a térfogati hányad szerint úgy, hogy akár a felvezetőjével, akár a kerámiahordozójával egyenlő legyen, így biztosítható a jó mechanikai és termikus kapcsolat különböző hőmérsékleteken. Mostanában már celluláris telefonadókban és laptopokban hőelvezetésre, valamint villanymozdonyok nagyteljesítményű elektronikáihoz is használják. 80% súlycsökkenés érhető el a rézhez képest, 65% a mikrohullámú és röntgensövekhez is gyakran használt Kovarhoz (FeNiCo ötvözet) képest, miközben akár tűzszerez hővezetés is elérhető. A Hubble űrteleszkóp antennájának hullámvezető árboca (b) AA6061 ötvözet alapú 40% szénszálat tartalmazó kompozitból készült, ekkor egyszerre használják ki, hogy a kompozit nagy fajlagos szilárdságú, jó hővezető és jó elektromos vezető, ezzel a többfunkciós kivitelezéssel 40%-os súlycsökkenést lehetett elérni. A speciális lehetőségekre a sportszergyártásban is hamar felfigyeltek, manapság igen gyakori a profi sporteszközök, például golfütő, baseballütő, korcsolyaél (c), kerékpárvázak esetén a kompozitok nagy szilárdságának, kis súlyának, nagy kopásállóságának kihasználása. [2]

1.2 Az általunk vizsgált kompozit alkotói

Az értekezésben vizsgált részecskeerősítésű fémmátrixú kompozit alapanyaga AA6061 alumínium ötvözet, amely 20% Al_2O_3 kerámia részecskéket tartalmaz. A Duralcan kompozitot keveréses öntéssel állították elő, majd meleg sajtolással tömörítették és alakították 12 mm átmérőjű hengeres rúddá. Az eljárás alapjait az 1980-as években Skibo és Schuster dolgozta ki [9], [10]. (Az eljárásukat és az induló cégüket, a Dural Composites-t az Alcan felvásárolta, majd további fejlesztéseket fektetve bele, a világ legnagyobb részecskeerősítésű kompozit-ellátója lett.) A kompozit alkotóinak főbb fizikai tulajdonságait az 1.1. táblázatban foglaltuk össze.

Fizikai tulajdonság	Mátrix	Erősítőfázis
Anyag	AA6061-T6 Al-1,0Mg-0,6Si-0,3Cu-0,2Cr	Al_2O_3 kerámia részecskék
Térfogati hányad	80%	20%
Sűrűség	2,700 Mg/m ³	3,985 Mg/m ³
Young-modulus	68,9 [*] –72,3 GPa	370–385 GPa
Poisson-szám	0,30–0,33	0,22
Folyáshatár	276 [†] –300 [‡] MPa	≈3000 MPa
Szakítószilárdság	≈310 MPa	≈300 MPa
Nyújthatóság	12–17%	–
Vickers keménység	107–122	1365
Lineáris hőtágulás (25–530 °C)	23,6–25,6 ·10 ⁻⁶ 1/K	5,5–8,5 ·10 ⁻⁶ 1/K
Fajhő (25–530 °C)	0,896 kJ/kg K	0,753–1,172 kJ/kg K
Hővezetés (25–530 °C)	167 W/m K	46–13 W/m K
Olvadáspont	582 (S) – 651,7 (L) °C	2054 °C
Rácsszerkezet	Felületen centrált köbös	Romboéderez

1.1. táblázat — Az általunk vizsgált kompozit alkotóinak főbb fizikai tulajdonságai [11]–[14]

1.3 A fémmátrixú kompozitok effektív fizikai tulajdonságait befolyásoló hatások

A fémmátrixú kompozitok makroszkopikus tulajdonságait a fémmátrix, a kerámiafázis és a közöttük lévő határfelület tulajdonságai határozzák meg. A gyártástechnológia fő feladata, hogy olyan kompozit készüljön, amelynek a felépítése legközelebb van az optimális szerkezethez, tehát olyan minimális porozitású kompozit, amelyben a mátrix és a kerámia megfelelő kötésben van egymással. Ez azt jelenti, hogy például CFRM anyagokban gyenge határfelületet kell létrehozni a

* A nyújtási és összenyomási Young-modulus átlaga. Az összenyomási Young-modulus kb. 2%-kal nagyobb, mint a nyújtási.

† Nyújtás esetén

‡ Összenyomás esetén

jó hosszirányú, illetve erős határfelületet kell létrehozni a jó keresztirányú terhelhetőség eléréséhez. A gyenge határfelület esetén ugyanis a repedésterjedés a határfelület mentén fog könnyen bekövetkezni, míg erős határfelület és erős mátrix esetén a repedésterjedés mind a mátrixban, mind az erősítőfázisban létrejöhet. Azonban ha gyenge a mátrix, de erős a határfelület és az erősítőfázis, akkor csak a mátrixban terjedhet repedés [15].

A kötés kialakulásában a folyékony mátrix és az erősítőfázis közötti nedvesítés játszik fontos szerepet, amely függ az olvadt mátrix és az erősítőfázis elektronszerkezetétől, a hőmérséklettől, az időtől, a lejátszódó reakció hőjétől, a körülvevő gázatmoszférától, az erősítőfázis érdességétől és kristályszerkezetétől. Az erősen ionos kerámiák (például Al_2O_3) nehezen, míg a fémszerűek (TiC, ZrC) sokkal könnyebben nedvesednek. A felületi érdesség ugyan megnöveli a határfelületi tapadást, azonban ennek hatása a határfelületi nyírási szilárdságra másodrendű a kémiai kötéséhez képest.

A kompozitok gyártásakor mindig felmerülő egyik legfontosabb hatás az alkotók hőtágulási együtthatójának különbségéből ered. A kompozitot magas hőmérsékleten gyártják, majd lehűléskor belső feszültségek keletkeznek az anyagban. Ezek a belső feszültségek olyan nagyok fémmátrixú kompozitok esetén, hogy a mátrixban képlékeny deformáció történik. A mátrix és az erősítőfázis közötti túlságosan nagy hőtágulási különbséget ajánlatos elkerülni, mert a belső feszültségek olyan nagyok lehetnek, hogy a határfelület károsodását idézheti elő. A magas hőmérséklet kedvez a diffúziós folyamatoknak is, ezzel nemcsak a mátrix és az erősítőfázis közötti kötés válhat erősebbé, hanem a kémiai reakciók is felgyorsulhatnak a fém és a kerámia között, amivel kiválások keletkezhetnek a határfelületeken. Morfológiailag tipikusan kétféleképpen különböztetünk meg: amikor egyenletes spinell réteg alakul ki a részecske felületén, illetve amikor diszkrét kiválások nukleálódnak a felületen. Ezek a határfelületen létrejövő új fázisok jelentősen befolyásolhatják a fém és a kerámiarészecske közötti erőátvitelt, és ezzel a kompozit makroszkopikus mechanikai tulajdonságait. A kémiai reakciókkal kapcsolatban fontos megjegyezni, hogy míg egy mérsékelt reakció növelheti a kötés erősségét, hevesebb reakciók tönkreteszhetik az erősítőanyagot. Továbbá a határfelület erőssége és a határfelületi reakciók közötti kapcsolat anyagfüggő. Például a Mg–C rendszerben gyenge, az Al– Al_2O_3 AltexTM (Sumitomo Chemical) szálak esetén erős határfelületi kötés alakul ki, holott egyik esetben sincs kémiai reakció.

Ha a fém anyaga nemesedő ötvözet, mint jelen esetben is, akkor az öregedés folyamatára is hatással lehet a kompozitszerkezet. Általánosságban az mondható, hogy az öregedési kinetika felgyorsul a kerámiarészecskék hatására, és hatással lehet még rá a részecskék morfológiája, mérete, térfogati hányada is, ugyanis ezek befolyásolják a képlékenységet és a visszamaradó termikus feszültségek nagyságát. Ugyanakkor a nagy fajlagos határfelület miatt felerősödhet a felületre való diffundálás jelentősége, ami szintén fontos szerepet játszhat a kiválási kinetika alakulásában [16]. Részletes vizsgálatok azonban kimutatták, hogy az AA6061-es ötvözet

esetében Al_2O_3 részecskéket alkalmazva nem változik lényegesen az öregedési kinetika, sem akkor, ha a részecskék térfogati hányadát megváltoztatták, sem akkor, ha a részecskék alakja lekerekített volt [17]–[18]. Ugyanakkor, ha részecskék helyett szafil szálakkal (Al_2O_3) erősítik az ötvözetet, akkor lényegesen megváltozik az öregedési kinetika [19]. Az öregedési kinetikát az is megváltoztathatja, hogy a határfelület mentén



kémiai reakcióval keletkező spinell Mg-ban szegény részecskét hoz létre a mátrixban a határfelület közelében. Így végeredményben ötvözőkoncentráció-gradiensek alakulnak itt ki, amelyek ismét kihatással lehetnek a makroszkopikus mechanikai tulajdonságokra.

Érdemes még megemlíteni az ipari ötvözetekben mindig jelenlévő szennyeződések hatását is. Az alumíniumötvözetekben mindig jelen van többnyire Fe, Si, Cu, stb. szennyező, amelyek rosszul oldódnak az olvadt fémekben. Előállításakor az olvadt fémből és kerámiából álló rendszert viszonylag gyorsan le kell hűteni, hogy a túlzottan sok határfelületi reakció elkerülhető legyen, amely hatására a mátrix és az erősítőanyag hőkapacitásában és hővezetésében lévő különbségek miatt lokális hőmérsékletgradiensek jönnek létre. Következésképpen jelenleg az az általánosan elfogadott nézet, hogy a kompozit megszilárdulásának folyamatában a mátrix belseje kezd először megszilárdulni, majd a front továbbhalad az erősítőfázis felülete felé, maga előtt tolvaa a rosszul oldódó szennyezőket, ezzel inhomogenitásokat létrehozva a határfelületeknél, amelyekre akár a későbbi hőkezelések során kiválások nőhetnek. Ezeket a nem kívánt diszkrét kiválásokat megfelelő hőkezeléssel vissza lehet oldani a mátrixba. Itt érdemes megjegyezni, hogy a fémiparban elterjedten használt szemcsefinomító anyagok (Zr, Ti, Mn) — amelyeket igen kis, a szennyezőkéhez hasonló koncentrációban kevernek az ötvözetekhez, hogy finoman diszpergált intermetallikus fázisokat hozzanak létre, amelyek felületén megindul nukleáció az ötvözet belsejében sok csírából indulhat, így végül kisebb szemcseméretet eredményez, és a későbbi hőkezelési folyamatokban lényegében nem vesz részt — alkalmatlanná teszik a fém kompozit gyártására.

A kompozitok témájában folyó kutatások egyik kedvelt irányvonala a kompozitok mikroszerkezetének hatása a mechanikai tulajdonságokra, illetve a mechanikai tulajdonságok jóslhatósága a szerkezeti információk alapján, továbbá a szerkezet optimalizálása a kívánt terhelési célokra. A mechanikai tulajdonságokra elsődleges hatása van az erősítőfázis térfogati hányadának, de lényeges hatása van az erősítőfázis térbeli irányítottságának (szálak, részecskék), az erősítőfázis térbeli eloszlásának, részecskecsoportosulásnak, részecskeméretnek, részecskealaknak.

1.4 A kutatás célja

A kompozitokra egyre növekvő alkalmazási területük ellenére sincsenek kielégítő anyagmodellek, amelyekkel tulajdonságaikat pontosan jóslni lehetne. Egy kompozitanyag

minden részletére kiterjedő modell az 1.3 fejezet fényében valószínűleg bonyolultsága miatt nem állítható fel, azonban kiemelve a főbb paramétereket, azok hatása tanulmányozható, és közelítő becsléseket végezhetünk a modellezett anyag tulajdonságaira vonatkozóan. Ezeket az eredményeket összehasonlíthatjuk a valódi anyagon — jelen esetben AA6061 ötvözet alapú Al_2O_3 részecskékkel erősített kompoziton — mért értékekkel. Következésképpen egyik fő feladatunk meghatározni, hogy mely szerkezeti tulajdonságok határozzák meg döntően a kompozitok mechanikai viselkedését, és melyek játszanak kisebb szerepet. Elsősorban a leggyakrabban alkalmazott anyagvizsgálati terhelést, az egytengelyű összenyomást választottuk.

Ugyanakkor léteznek analitikus elméleti közelítések heterogén anyagok rugalmas tulajdonságainak becslésére, azonban még nincs összehasonlítás valódi anyagra alkalmazva ezeket a formulákat. Ezért megvizsgáljuk, hogy vajon az elméleti közelítések mennyiben alkalmazhatók a valódi anyagra, ezzel mintegy leellenőrizve az általunk felállított modell helyességét.

A valódi anyag modellezéséhez természetesen számítógépes szimulációkat kell végeznünk, a nagy mennyiségű számítás elvégzésére. Azonban a pontos eredmények eléréséhez felépítendő modellek olyan nagyok és számításigényesek, hogy közvetlen módon nem lehetséges a kompozitból elegendően nagy térfogatot, kellő szerkezeti finomsággal modellezni. Ezért fel kell tennünk azt a kérdést, hogy lehet-e olyan modellezési stratégiákat kidolgozni, amelyek ennek ellenére lehetővé teszik a mechanikai tulajdonságok becslését. Továbbá, ha kivitelezhetőek ilyen modellek, akkor hogyan lehet optimálisan végrehajtani bizonyos mechanikai tulajdonságok modellezését, hogy lehetőleg pontos, ámde rövid idő alatt elvégezhető analízist kapjunk.

2 Irodalmi áttekintés

Az általános kontinuummechanikai bevezetőben csak az értekezés tárgyalásához feltétlenül szükséges fogalmakat tekintjük át a 2.1 alfejezetben. A kompozitok mechanikai tulajdonságainak leírása azonban a szerkezeti ismeretekre épül, ezért az általunk használt fontosabb szerkezeti paramétereket ismertetjük röviden a 2.2 alfejezetben.

Részletesen tárgyaljuk a kompozitok rugalmas tulajdonságainak becslését célzó elméleti mechanikai *ab initio* megközelítéseket a 2.3 alfejezetben, így érzékelhetőek a probléma bonyolultságából adódó nehézségek. A téma másik központi kérdése a reprezentatív térfogat nagyságának elméleti meghatározása, amelyet a 2.4 alfejezetben ismertetünk röviden. Ezen elméleti számítások eredményeit a későbbiekben összehasonlítjuk az adott kompozitra illeszkedő modellekre kapott eredményekkel, ezért tartjuk fontosnak az analitikusan számolható eredmények alapjainak tisztázását, amelyet terjedelmi okokból döntően a Függelékben teszünk meg. A 2.5 alfejezetben pedig tömören ismertetjük a kompozitok alakítási tulajdonságaira vonatkozó főbb irodalmi eredményeket.

2.1 Kontinuummechanikai bevezetés

A továbbiakban előforduló matematikai képletekben alapértelmezésként a következő jelölésrendszert alkalmazzuk. Vastagon szedett betűkkel jelöljük a vektor-, és a kétindexes tenzormennyiségeket, kivéve amikor komponenseikre hivatkozunk. A futóindexek 1-től 3-ig vesznek fel értéket, ha ezt külön nem jelöljük. Az összegzésekben az Einstein-konvenciót alkalmazzuk, azaz az ismétlődő indexek esetén az adott indexre automatikus összegzést végzünk, és ezt külön nem jelöljük. Az $a_{i,j}$ az $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ vektortér i -edik komponensének j -edik helykomponens szerinti parciális differenciálhányadosát jelenti, azaz

$$(2) \quad a_{i,j} \equiv \frac{\partial a_i}{\partial x_j},$$

ahol \mathbf{x} a helyvektor, és a fentiek értelmében például $a_{i,i}$ az $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ vektortér divergenciáját jelenti. A fizikai irodalomban használatos egyszerűsített jelölésrendszert követjük (a mérnöki irodalomban alkalmazott némileg eltérő jelölésrendszerhez képest) akkor is, amikor a négyindexes tenzorokat normál szedésű betűkkel jelöljük, valamint a tenzorok közötti kontrakciókat külön jellel nem jelöljük. A definíció szerinti egyenlőségeket gyakran jelöljük a \equiv szimbólummal.

2.1.1 Kontinuummechanikai alapok

A kontinuummechanika általános folytonos közegek (kontinuum) alakváltozásának leírásával foglalkozik. Egy deformált test alakjának leírása általában az $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ elmozdulástérrel

történik, amely azt írja le, hogy a deformálatlan test egy \mathbf{r} helyen lévő pontja deformáció után az $\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$ helyre kerül. Ekkor az alakváltozást a szimmetrikus

$$(3) \quad e_{ij}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i} + u_{k,i}u_{k,j})$$

dilatációtenzorral jellemezhetjük, amely szemléletesen az egyes anyagdarabok relatív megnyúlását jelenti. Azonban kis deformációk esetén az elmozdulástér gradiensében másodfokú tagot elhanyagolhatjuk, így a linearizált

$$(4) \quad \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i})$$

deformációtenzorhoz jutunk, amely továbbra is szimmetrikus, tehát független elemeinek száma hat. Az elmozdulástérnek azonban csak három független komponense van, tehát ha az ε deformációtenzorral akarjuk leírni az alakváltozást, akkor további összefüggést lehet találni a tenzorelemek között, amelyet St. Venant-féle kompatibilitási feltételnek nevezünk, és a

$$(5) \quad \nabla \times \nabla \times \varepsilon = \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} \varepsilon_{km,ln} = 0$$

alakot ölti, ahol ε a háromindexes Levi-Civita-féle permutációtenzort jelöli.

A kinematikai leíráson túl a deformált anyag belsejében létrejövő állapot dinamikai jellemzése is szükséges, ezt a $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$ feszültségtér bevezetésével tehetjük meg, amely kifejezi az anyagban \mathbf{r} helyen kiszemelt dS felületelemre ható

$$(6) \quad d\mathbf{F}^S = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})dS$$

úgynevezett felületi erőt. Ezen kívül az anyagban még olyan \mathbf{f} erők is hathatnak, amely az anyag \mathbf{r} helyen kiszemelt dV térfogatelemére ható

$$(7) \quad d\mathbf{F}^V = \mathbf{f}(\mathbf{r})dV$$

úgynevezett térfogati erővel adható meg.

Az elmozdulástér általában térfogati erők (\mathbf{f}) és felületi erők ($\boldsymbol{\sigma}$) hatására alakul ki, amelyek hatását Newton II. törvénye alapján, (6) és (7) felhasználásával az anyagbeli \mathbf{r} helyen kiszemelt dV térfogatú elemre

$$(8) \quad \rho(\mathbf{r})\mathbf{a}(\mathbf{r})dV = d\mathbf{F}^V + d\mathbf{F}^S = \mathbf{f}(\mathbf{r})dV + \nabla\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})dV$$

alakban írhatunk, ahol $\rho(\mathbf{r})$ és $\mathbf{a}(\mathbf{r})$ a térfogatelem sűrűsége és gyorsulása az \mathbf{r} helyen, és amelyben szokásos módon felhasználtuk a Gauss-tételt. A deformálható test mozgásegyenletéből az

$$(9) \quad \mathbf{f}(\mathbf{r}) + \nabla\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = 0$$

egyensúlyi egyenletet kapjuk. Amennyiben a térfogati erők hatása elhanyagolható a létrejött deformációk vizsgálatá szempontjából, (9) tovább egyszerűsödik:

$$(10) \quad \nabla\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = 0$$

2.1.2 Anyagmodellek

2.1.2.1 Rugalmas alakítás

A kontinuumban kialakult feszültségteret az anyagegyenletek kapcsolják össze a deformációs terrel. Általánosan megadható anyagegyenlet, állapotegyenlet nem létezik, ezért csak bizonyos feltételek esetén lehet matematikailag is megfogalmazni. Ezeket az egyenleteket szokás általánosságban konstitutív egyenleteknek nevezni. Például a lineáris rugalmasságtan feltételei esetén az általánosított Hooke-törvény értelmében lineáris összefüggést kapunk:

$$(11) \quad \sigma_{ij} = L_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0),$$

ahol L a négyindexes rugalmasságiegyüttható-tenzor, ε_{kl}^0 pedig egyéb, nem közvetlenül a feszültségtér (hanem például hőtágulás) hatására kialakult deformáció. A rugalmas test U deformációs energiája kifejezhető

$$(12) \quad U = \frac{1}{2} \int_V \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dV = \frac{1}{2} \int_V L_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} dV$$

formában, amely segítségével belátható, hogy az L tenzor 81 eleme nem független egymástól, hanem a feszülstégtenzor és a deformációtenzor szimmetrikussága, valamint (12) miatt a következő szimmetriarelációknak tesz eleget:

$$(13) \quad L_{ijkl} = L_{jikl}, \quad L_{ijkl} = L_{ijlk}$$

és

$$(14) \quad L_{ijkl} = L_{klij}.$$

Így az L tenzor csak 21 független rugalmassági együtthatót tartalmazhat egy általános anizotróp rugalmas test esetén. Ha a test egyéb szerkezeti szimmetriákkal is rendelkezik, akkor ez a szám tovább csökkenhet. Például köbös szimmetriájú rácsszerkezettel rendelkező fémek (Al, Cu, Fe, stb.) esetén három, míg izotróp test (például nem texturált polikristályos anyag) esetén két független rugalmassági együttható van. A gyakorlatban a különböző kísérletek által megszabott paraméterek alapján szokásosan a következő együtthatókat vezetik be: a

$$(15) \quad K \equiv \left(-\frac{1}{V} \frac{\Delta V}{\Delta p} \right)^{-1}$$

térfogati rugalmassági modulus, amelyet a V térfogatú próbatest Δp nyomással történő hidrosztatikus terhelés során tapasztalt relatív térfogatváltozása alapján, az

$$(16) \quad E \equiv \frac{l}{A} \frac{\Delta F}{\Delta l}$$

Young-modulus, amelyet egytengelyű nyújtási kísérletben az A keresztmetszetű, l hosszúságú próbatest ΔF nyújtóerő hatására történő hosszváltozása alapján, a

$$(17) \quad G \equiv \frac{h}{A} \frac{\Delta F}{\Delta s}$$

nyírási modulust, amelyet a tiszta nyírási kísérletben az A keresztmetszetű, h magasságú próbatest ΔF nyíróerő hatására bekövetkező Δs nyírási hossza alapján, és végül a

$$(18) \quad \nu \equiv -\frac{\Delta l}{\Delta d}$$

Poisson-számot, amelyet az egytengelyű nyújtási kísérletben előidézett Δl hosszváltozáshoz tartozó Δd keresztirányú méretváltozás (haránt-összehúzódás) alapján definiálunk. Amennyiben ezek a rugalmasságtani együtthatók a folyamat során nem tekinthetők állandónak (a lineáris rugalmasságtan feltételei nem teljesülnek), akkor a (15)–(18) képletekben szereplő véges differenciák helyett infinitezimális megváltozásokkal szokás ezeknek a mennyiségeknek az adott körülmények közötti pillanatnyi értékét definiálni. Ha az anyag anizotróp, akkor ezek a mennyiségek irányfüggőek lesznek, ha izotróp, akkor pedig bármelyik kettő ismeretében megadható a többi mennyiség. Gyakran használt összefüggések ezen együtthatók között [20]:

$$(19) \quad K = \frac{2G(1+\nu)}{3(1-2\nu)} = \frac{E}{3(1-2\nu)} = \frac{EG}{3(3G-E)},$$

$$(20) \quad E = \frac{9KG}{3K+G} = 2(1+\nu)G,$$

$$(21) \quad G = \frac{E}{2(1+\nu)},$$

$$(22) \quad \nu = \frac{3K-2G}{6K+2G}.$$

Szokásos még a deformációt és feszültséget mátrix helyett vektoralakban reprezentálni. Ezen mennyiségeknek hat független komponensük van, így hatdimenziós (Voigt-féle) vektorokként kezelhetők a következőképpen:

$$(23) \quad \underline{\varepsilon} \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix}, \text{ és } \underline{\sigma} \equiv \begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix}.$$

Megjegyezzük, hogy a Voigt-féle jelölésrendszerben ε_4 , ε_5 és ε_6 deformációkomponensek helyén rendre a γ_{23} , γ_{13} és γ_{12} nyírásszögek állnak, így (23) felírásánál figyelembe vettük a

$$(24) \quad \gamma_{23} = 2\varepsilon_{23}, \quad \gamma_{13} = 2\varepsilon_{13} \text{ és } \gamma_{12} = 2\varepsilon_{12}$$

összefüggéseket. Ennek következményeként a rugalmasságiegyüttható-tenzor kétindexes mennyiségként kifejezhető, ugyanis ha csak a (13) szimmetriarelációt alkalmazzuk, akkor egy 6×6 -os mátrixba rendezhetjük a rugalmassági együtthatókat, amely a (14) reláció értelmében szimmetrikus lesz:

$$(25) \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{1111} & L_{1122} & L_{1133} & L_{1123} & L_{1113} & L_{1112} \\ L_{1122} & L_{2222} & L_{2233} & L_{2223} & L_{2213} & L_{2212} \\ L_{1133} & L_{2233} & L_{3333} & L_{3323} & L_{3313} & L_{3312} \\ L_{1123} & L_{2223} & L_{3323} & L_{2323} & L_{2313} & L_{2312} \\ L_{1113} & L_{2213} & L_{3313} & L_{2313} & L_{4313} & L_{4312} \\ L_{1112} & L_{2212} & L_{3312} & L_{2312} & L_{4312} & L_{4212} \end{pmatrix}.$$

Ekkor a (11) általánosított Hooke-törvény a kompaktabb

$$(26) \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon}$$

alakot veszi fel (a kezdeti deformációt nullának feltételezve), amelyet indexesen is kiírunk:

$$(27) \quad \sigma_i = \sum_{j=1}^6 C_{ij} \varepsilon_j.$$

Izotrop anyag esetén a kétindexes rugalmassági mátrix

$$(28) \quad \mathbf{C} = \frac{1}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} (1-\nu)E & \nu E & \nu E & 0 & 0 & 0 \\ \nu E & (1-\nu)E & \nu E & 0 & 0 & 0 \\ \nu E & \nu E & (1-\nu)E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)E}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)E}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)E}{2} \end{pmatrix}$$

alakot ölt, ahol az E és ν a két függetlennek tekintett rugalmassági együttható.

2.1.2.2 Képlékeny alakítás

Ha a rugalmas alakításon túl maradandó alakváltozás is történik, képlékeny alakváltozásról beszélünk. Ekkor azonban már jóval bonyolultabb anyag törvényekkel kell dolgoznunk, amelyek általánosan

$$(29) \quad f(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\sigma}, \dot{\boldsymbol{\sigma}}, T, S_1, \dots, S_n) = 0$$

függvényalakban adhatók meg, ahol S_i ($i=1, \dots, n$) paraméterek a szerkezettől függenek. Tapasztalat, hogy szilárdtestek esetén adott $\boldsymbol{\sigma}$ feszültségek hatására meghatározott $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ sebességű alakváltozás jön létre adott T hőmérsékleten, azaz

$$(30) \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = f(\boldsymbol{\sigma}, \dot{\boldsymbol{\sigma}}, T, S_1, \dots, S_n)$$

alakban is előállítható a konstitutív egyenlet. Fémek esetén ismert, hogy szobahőmérsékleten az extrém alakítási sebességektől eltekintve a képlékenységet jellemző tulajdonságok az alakítás sebességétől csak kis mértékben függenek, így szokás elhanyagolni ezt az effektust. Továbbá feltesszük, hogy a képlékeny alakváltozás állandó térfogat mellett megy végbe, hiszen kristallográfiai csúszások következtében jön létre, és ezért feltesszük, hogy a hidrosztatikus

feszültségeknek nincs hatásuk folyás kialakulására. Azaz, ha a σ feszültségtenzorból kivonjuk a hidrosztatikus komponenset, a

$$(31) \quad \sigma_{ij}^D = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij}$$

deviátortenzort kapjuk, és a folyásfeltétel

$$(32) \quad f(\sigma^D) = 0$$

alakban írható fel. Gyakorlatban makroszkopikusan izotrópnek tekinthető polikristályos anyagokon is jól működő folyásfeltételt von Mises fogalmazta meg. Eszerint ha a nyírási alakváltozásokban felhalmozott

$$(33) \quad U_{nyíráás} = \frac{1}{4G} \sigma_{ij}^D \sigma_{ij}^D$$

rugalmas energia elér egy kritikus értéket, akkor kezdődik meg a képlékeny alakváltozás. A kritikus helyzet von Mises szerint az, amikor a feszültségdeviátor második invariánsa elér egy τ_{kr}^2 kritikus értéket, tehát

$$(34) \quad \frac{1}{2} \sigma_{ij}^D \sigma_{ij}^D = \tau_{kr}^2,$$

vagy tenzorkomponensekkel kifejezve

$$(35) \quad \frac{1}{6} \left((\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 \right) + (\sigma_{12}^2 + \sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2) = \tau_{kr}^2.$$

A tiszta nyírás esetén τ_{kr} megegyezik a τ_f kritikus nyírófeszültséggel. A (35) egyenlet alapján kimutatható, hogy a von Mises kritérium érvényessége esetén a tiszta nyírás τ_f és a tiszta nyújtás σ_f folyáshatára között a

$$(36) \quad \sigma_f = \sqrt{3} \tau_f$$

kapcsolat áll fenn. A folyásfeltételt felírhatjuk a

$$(37) \quad \bar{\sigma} \equiv \sqrt{\frac{3}{2} \sigma_{ij}^D \sigma_{ij}^D}$$

ekvivalens (átlagos vagy effektív) feszültséggel is:

$$(38) \quad \sigma_f = \bar{\sigma}.$$

Az időfüggetlen képlékeny alakítás klasszikus elmélete a folyáshatár létezésére épül, azaz a folyáshatár elválasztja a rugalmas és a képlékeny alakítási folyamatot. Általában egytengelyű nyújtási vagy összenyomási mérésekből határozzák meg a folyásfeszültséget*. Egy ilyen kísérlet során a rugalmas tartományban deformált test a terhelés megszüntetésével visszanyeri eredeti alakját, míg ugyanilyen fel- és leterhelési ciklust a képlékeny tartományban végrehajtva a test maradós alakváltozást szenved, amelynek mértékét képlékeny deformációnak nevezzük. Tehát ha

* A folyáshatár elnevezés alatt a kezdetben képlékenyen még nem deformált anyag folyásfeszültségét értjük, tehát ez a legkisebb folyásfeszültség egy alakításra keményedő anyag esetén.

ε a teljes deformáció nagysága és leterhelés közben ε_e rugalmas deformáció történik, akkor a maradék deformáció ε_p , melyekre teljesül, hogy

$$(39) \quad \varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p.$$

Ideálisan képlékeny anyag esetén a folyáshatár elérésekor folyásnak indul, és a deformáció ekkor határozatlan, azonban ennél jobb anyagmodellt kapunk, ha az alakítási keményedést figyelembe vesszük (alakításra lágyuló anyagokkal most nem foglalkozunk). A folyásfeszültség a képlékeny alakítás során nő, és így az ε_p deformáció — általában nemlineáris — függvénye. Az alakítási keményedés értékét

$$(40) \quad H \equiv \frac{\partial \sigma_f}{\partial \varepsilon_p}, \quad \varepsilon_p > 0$$

adja meg. Ha nem áll rendelkezésünkre anyagszerkezeten alapuló modell, akkor a kísérleti eredményekre támaszkodhatunk, és a folyásfelületet az egyszerűség kedvéért egy izotróp modellel kezelhetjük. Jól működnek általában azok a modellek, amelyek azt feltételezik, hogy a κ paraméter szerint táguló folyásfelület

$$(41) \quad Q(\underline{\sigma}, \kappa) = 0$$

alakban írható, ahol $\underline{\sigma}$ jelöli a σ tenzor komponenseiből képzett 9 elemű vektort, és ekkor a folyási sebesség a folyásfelületre merőleges és kifelé irányuló, azaz

$$(42) \quad \dot{\underline{\varepsilon}}^p = \dot{\lambda} Q_{\underline{\sigma}}, \quad \dot{\lambda} \geq 0,$$

ahol $\dot{\lambda}$ az úgynevezett képlékenységi konzisztencia paraméter. Ha a κ paraméter változását kapcsolatba hozzuk a plasztikus munkavégzés sebességével, és így a $\dot{\lambda}$ paraméterrel, akkor egy feszültség dimenziójú mennyiséget kapunk, amelyre

$$(43) \quad \dot{\kappa} = \underline{\sigma} \dot{\underline{\varepsilon}}_p = \sigma_f(\kappa) \dot{\varepsilon}_p''$$

alakú kifejezéssel illeszthetjük az egytengelyű nyújtási vagy összenyomási kísérlet eredményét, ahol ε_p'' és σ_f a kísérletben mért képlékeny deformáció és folyásfeszültség. Egy másik megközelítésben a κ paramétert a kumulálódott képlékeny deformációnak vesszük, ekkor

$$(44) \quad \dot{\kappa} = |\dot{\underline{\varepsilon}}_p| = \dot{\lambda} |Q_{\underline{\sigma}}|,$$

és ezt illesztjük a mérési eredményekhez.

Ezek után a konstitutív egyenletet kell felépíteni, most a Prandtl–Reuss-féle megközelítést fogjuk alkalmazni. Az alakítási keményedést

$$(45) \quad H \equiv \frac{d\bar{\sigma}}{d\bar{\varepsilon}^p}$$

definiálja, ahol

$$(46) \quad d\bar{\varepsilon}^p = \sqrt{\frac{2}{3} d\varepsilon_i^p d\varepsilon_j^p}$$

az ekvivalens képlékeny deformáció növekménye. A (42) folyástörvényt speciálisan alkalmazva differenciális formában a képlékeny deformáció növekményére felírhatjuk, hogy

$$(47) \quad d\boldsymbol{\varepsilon}^p = d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}},$$

ahol

$$(48) \quad \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial \sigma_{ij}}$$

a folyásfelület normálisa (38) alapján. Most a (11) Hooke-törvényt felírjuk differenciális alakban úgy, hogy a képlékeny deformációt kezdeti deformációként kezeljük:

$$(49) \quad d\boldsymbol{\sigma} = L(d\boldsymbol{\varepsilon} - d\boldsymbol{\varepsilon}^p),$$

majd (47) felhasználásával kapjuk, hogy

$$(50) \quad d\boldsymbol{\sigma} = L d\boldsymbol{\varepsilon} - L(d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}}),$$

amelyet beszorunk (48) bal oldalával:

$$(51) \quad \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} d\boldsymbol{\sigma} = \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} L d\boldsymbol{\varepsilon} - \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} L(d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}}).$$

Felismerve, hogy

$$(52) \quad d\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} d\boldsymbol{\sigma},$$

és a (45) definíció (51) összefüggésbe történő behelyettesítésével, majd átrendezésével kapjuk:

$$(53) \quad d\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \frac{\nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} L d\boldsymbol{\varepsilon}}{H + \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} L \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}}},$$

amelyet (50) kifejezésbe visszahelyettesítve a

$$(54) \quad d\boldsymbol{\sigma} = \left(L - \frac{(L \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}}) \otimes (L \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}})}{H + \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}} L \nabla \bar{\boldsymbol{\sigma}}} \right) d\boldsymbol{\varepsilon} \equiv L^p d\boldsymbol{\varepsilon}$$

konstitutív egyenlethez jutunk, ahol L^p a rugalmas-képlékeny érintőmodulusok tenzora [21].

2.2 Anyagok mikroszerkezetének elméleti leírása

Az anyagok szerkezetének matematikai leírására már számos módszert kidolgoztak, ezeknek kiterjedt irodalmából most a teljesség igénye nélkül megemlítünk néhány olyan szerkezetleíró függvényt és módszert, amelyeket a későbbiekben felhasználunk. Pusztaán a definíciókra és a fontosabb tulajdonságokra szorítokozunk, bővebb általános kifejtés az összefoglaló irodalmakban található (pl. [22]).

2.2.1 Részecskealak jellemzése

A kompozitot alkotó erősítőfázis jellemzésénél a legbonyolultabb feladat a szabálytalan alakú részecskék alakjának besorolása, osztályozása mennyiségi leírása. Éppen ezért a választott módszer erősen függ a megoldandó problémától és a kitűzött céltól. Az általunk jellemezni kívánt kompozitban jellemzően konvex részecskék találhatók, amelyek kissé szögletesek ugyan, de

soklapúak, így alkalmassá válhatnak olyan durva közelítésnek tűnő eljárások, ahol a lehető legkevesebb paraméterrel leírható geometriai testeket próbálunk a legnagyobb hasonlóság elve alapján illeszteni hozzájuk. Például ilyen a közismerten használt ekvivalens gömbök illesztése valamelyik jellemző paraméter alapján, például térfogat vagy tömeg szerint. Ennek előnye, hogy az ilyen gömbbel helyettesített részecskének nem változik meg a szerkezetben elfoglalt térfogati súlya.

A másik, valamivel több paraméterrel rendelkező legömbölyített test az általános ellipszoid, amelynek három féltengelyét kell optimálisan megválasztani, hogy a lehető legjobban illeszkedjen a részecskére. Erre egy nagyon jól bevált módszer a tehetetlenségnyomaték-tenzor alapján történő illesztés. Ekkor a térfogati pontos egyezőség nem garantált, de a részecske felszínét viszonylag jól követő, a részecske méretarányait és térbeli orientációját is jól visszaadó illesztéshez jutunk.

Egységnyi sűrűségű, V térfogatú anyagi test $\hat{\Theta}$ tehetetlenségnyomaték-tenzorának \mathbf{e}_i sajátvektorai a főtengetelyrendszer alapvektorai, és Θ_i sajátértékei pedig az egyes főtengetelyekre vonatkozó főtehetlenségi nyomatékok. Az illesztendő általános ellipszoid főtengetelyeként is az \mathbf{e}_i sajátvektorokat választva a kapott Θ_i főnyomatékokat kell az ellipszoid főnyomatékaival egyenlővé tenni. Ekkor a három féltengelyre három egyenletet kapunk, amelynek megoldásaiként az

$$(55) \quad a_i = \sqrt{\frac{5(Sp\hat{\Theta} - 2\Theta_i)}{2V}}$$

féltengelyek adódnak, ahol Sp a mátrix nyomát jelöli [23].

2.2.2 Korrelációs együttható

A statisztikai adatok kiértékelésénél gyakran használjuk a korrelációs együttható fogalmát, amelyet az $\{a_i\}_{i=1,\dots,N}$ és $\{b_i\}_{i=1,\dots,N}$ N elemű adatsorok esetén a

$$(56) \quad C_{ab} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(a_i - \bar{a})(b_i - \bar{b})}{\sigma_a \sigma_b}$$

összefüggés definiál, ahol

$$(57) \quad \bar{a} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i$$

jelöli egy tetszőleges $\{a_i\}_{i=1,\dots,N}$ adatsor átlagát, és

$$(58) \quad \sigma_a \equiv \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (a_i - \bar{a})^2}$$

jelöli ugyanennek az adatsornak az abszolút szórását. Általában $C_{ab} \geq 0,7$ korrelációs együttható esetén az $\{a_i\}_{i=1,\dots,N}$ és $\{b_i\}_{i=1,\dots,N}$ adatsorok erős, $0,3 \leq C_{ab} < 0,7$ esetén gyenge korrelációjáról beszélünk, míg $-0,3 < C_{ab} < 0,3$ esetén korrelálatlannak tekintjük az adatokat.

2.2.3 Részecsketávolságok eloszlása, egyenesúthossz-függvény

Az elkülönülő különböző fázisú térfogatok, részecskéket tartalmazó anyagok térbeli eloszlását kézenfekvő módon a közöttük lévő távolságok eloszlásával jellemezhetünk. A részecskék térbeli eloszlását a részecskék középpontjának elhelyezkedése alapján jellemezve meghatározható a középpontok $g(r)$ páreloszlás függvénye, amely annak a valószínűségével kapcsolatos, hogy egy véletlenszerűen kiválasztott részecske középpontjától r és $r + dr$ közötti távolságban — az r sugarú dr vastagságú gömbhéjban — található egy másik részecske középpontja. Pontosabban $4r^2\pi\rho g(r)dr$ megadja az e távolságban lévő részecskék középpontjainak átlagos számát, ahol ρ a középpontok számsűrűsége. Véletlen pontthalmaz esetén egy konstans $g(r) \equiv 1$ függvény lenne, azonban véletlen elrendeződésű véges kiterjedésű objektumok halmaza esetén a térfogati kizárás miatt kis r távolság esetén 0 értéket vesz fel, az első maximumhely az elsőszomszéd-távolsággal, a második maximumhely a másodsomszéd-távolsággal hozható kapcsolatba, és aszimptotikusan tarthat 1-hez nagy r távolság esetén.

További hasznos szerkezetjellemezési lehetőség, az úgynevezett egyenesúthossz-függvény (lineal-path) meghatározása (szokásos jelölése $L^i(r)$, ahol i a kiválasztott fázis sorszáma), amely annak a valószínűségét adja meg, hogy egy véletlenszerűen elhelyezett, r hosszúságú egyenes szakasz az adott fázisban fekszik teljes egészében [24]. Ez a függvény jellemzi az adott fázis összefüggőségét. Fontos tulajdonsága, hogy a fázis térfogati hányadának megfelelő értékről indul, majd monoton fogyó függvényként éri el a 0 értéket. Szemléletes jelentése, hogy értéke háromdimenziós izotrop anyag esetén éppen az adott fázis felületi hányadát adja egy r vastagságú háromdimenziós szelet levettett képén.

2.2.4 Korrelációs függvények: n-pont-valószínűségi függvények

Az előzőekhez képest egy kifinomultabb jellemzési lehetőséget adnak az anyagon belüli mikroszerkezeti viszonyokat jobban tükröző, matematikai szempontból teljesebb szerkezetleírást lehetővé tevő korrelációs függvények. (Megjegyezzük, hogy általánosan korrelációs függvénynek neveznek minden szerkezetleíró függvényt.)

Először definiáljuk az úgynevezett indikátorfüggvényeket vagy karakterisztikus függvényeket,

$$(59) \quad I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mathbf{r} \in V_i(\omega) \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases}$$

ahol ω a szerkezet lehetséges megvalósításait járja be az Ω „eseménytérben”, \mathbf{r} a helyvektor, és $V_i(\omega)$ az i -edik fázis által elfoglalt térfogat. Például kétfázisú rendszer esetén igaz, hogy

$$(60) \quad I^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) + I^{(2)}(\mathbf{r}, \omega) = 1.$$

Ezek a függvények tekinthetők valószínűségi változóknak és ekkor valószínűségi leírásokhoz is használhatók. Az előző példa szerint

$$(61) \quad \mathcal{P}\{I^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\} + \mathcal{P}\{I^{(2)}(\mathbf{r}, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\} = 1,$$

ahol

$$(62) \quad \mathcal{P}\{I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\}$$

jelöli annak a valószínűségét, hogy az i -edik fázisra vonatkozó indikátorfüggvény felveszi az \mathbf{r} helyen az 1 értéket, miközben bejárja a lehetséges szerkezeteket. Ebben a valószínűségi értelemben az (59) függvény segítségével már kifejezhető egy tetszőleges $F[I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega)]$ függvény várható értéke:

$$(63) \quad \langle F[I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega)] \rangle_{\omega} = \mathcal{P}\{I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\}F(1) + \mathcal{P}\{I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \mid \omega \in \Omega\}F(0),$$

ahol a $\langle \rangle_{\omega}$ a sokaságátlagot jelöli, azaz átlagolást az összes lehetséges megvalósításra.

Speciálisan, ha $F[I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega)] = I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega)$, akkor

$$(64) \quad S_1^{(i)}(\mathbf{r}) \equiv \langle I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega) \rangle_{\omega} = \mathcal{P}\{I^{(i)}(\mathbf{r}, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\},$$

ahol egyben definiáltuk az i -edik fázisra vonatkozó $S_1^{(i)}(\mathbf{r})$ egy pont-valószínűségi függvényt.

Erre alapozva lehet bevezetni az i -edik fázisra vonatkozó n -pont-valószínűségi függvényeket, amelyek

$$(65) \quad \begin{aligned} S_n^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) &\equiv \langle I^{(i)}(\mathbf{r}_1, \omega) I^{(i)}(\mathbf{r}_2, \omega) \dots I^{(i)}(\mathbf{r}_n, \omega) \rangle_{\omega} \\ &= \mathcal{P}\{I^{(i)}(\mathbf{r}_1, \omega) = 1, I^{(i)}(\mathbf{r}_2, \omega) = 1, \dots, I^{(i)}(\mathbf{r}_n, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\} \end{aligned}$$

definíciójában annak a valószínűségét fogalmazzuk meg, hogy az n darab $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$ helyen lévő pont az i -edik fázisba esik [25]. Szokásos még ezeket n -pont-korrelációs függvényeknek is nevezni. A definíció további általánosítása, hogy megengedjük, hogy az egyes pontok különböző, de meghatározott fázisokba essenek:

$$(66) \quad \begin{aligned} S_n^{(j_1 \dots j_n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) &\equiv \langle I^{(j_1)}(\mathbf{r}_1, \omega) I^{(j_2)}(\mathbf{r}_2, \omega) \dots I^{(j_n)}(\mathbf{r}_n, \omega) \rangle_{\omega} \\ &= \mathcal{P}\{I^{(j_1)}(\mathbf{r}_1, \omega) = 1, I^{(j_2)}(\mathbf{r}_2, \omega) = 1, \dots, I^{(j_n)}(\mathbf{r}_n, \omega) = 1 \mid \omega \in \Omega\} \end{aligned}$$

Megjegyezzük, hogy ezek a vegyes n -pont-valószínűségi függvények kifejezhetők (65) típusú függvényekkel [25]. Például kétfázisú anyag esetén

$$(67) \quad \begin{aligned} S_2^{(12)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \langle I^{(1)}(\mathbf{r}_1, \omega) I^{(2)}(\mathbf{r}_2, \omega) \rangle_{\omega} = \langle I^{(1)}(\mathbf{r}_1, \omega) [1 - I^{(1)}(\mathbf{r}_2, \omega)] \rangle_{\omega} \\ &= S_1^{(1)}(\mathbf{r}_1) - S_2^{(1)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \end{aligned}$$

alakban adható meg annak a valószínűsége, hogy az \mathbf{r}_1 és \mathbf{r}_2 helyen lévő pontok az 1 és 2 jelű fázisokba esnek. (Rövidebb elnevezéssel ezt kétpontfüggvénynek is nevezik.)

Ha az n -pont-valószínűségi függvények függenek a helyvektorok abszolút helyétől, akkor statisztikusan inhomogén anyagról beszélünk, azonban ha eltolásinvariánsak ezek a függvények, akkor statisztikusan homogén anyagról beszélünk. Ekkor már csak a helyvektorok relatív helyzetétől függenek, azaz nincs kitüntetett origó a rendszerben. Megjegyezzük, hogy ebből következően szigorúan véve statisztikusan homogén anyag csak végtelen kiterjedésű lehet. Ebből azonnal következik, hogy a (64) szerint definiált egypont-valószínűségi függvény mindenhol konstans, mégpedig az adott fázis f_i térfogati hányadát adja:

$$(68) \quad S_1^{(i)}(\mathbf{r}) = f_i.$$

Ha a rendszer statisztikusan homogén, de anizotróp, akkor az $S_n^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ függvények csak az $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_1$ vektoroktól fognak függeni.

Ha a rendszer statisztikusan homogén, akkor értelmes térfogati átlagokról beszélni, hiszen a tér különböző tartományai statisztikus értelemben hasonlóak. Ezen alapszik az úgynevezett ergodikus hipotézis, mely szerint a sokaság minden lehetséges megvalósítása szerinti átlagolás egyenértékű valamely egyetlen megvalósítás térfogatára vett átlagolással a végtelen térfogató határesetben. A hipotézis — teljesülése esetén — lehetővé teszi, hogy a sokaságtátlagokat helyettesítsük a végtelen térfogatra vett átlagokkal, például (65) esetén

$$(69) \quad \begin{aligned} & S_n^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_1) = \\ & = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_V I^{(i)}(\mathbf{r}', \omega) I^{(i)}(\mathbf{r}' + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \omega) \dots I^{(i)}(\mathbf{r}' + \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_1, \omega) d\mathbf{r}' \end{aligned}$$

alakban írható fel a homogén rendszer n -pont-valószínűségi függvénye.

Ha az n -pont-valószínűségi függvények forgatásinvariánsak, akkor statisztikusan izotróp anyagról beszélünk. Ez azt jelenti, hogy az $S_n^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ függvények az irányoktól nem fognak függeni, csak az $r_{jk} = |\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j|$ távolságoktól, például a kétpontfüggvény, amelyet autokorrelációs függvénynek is neveznek,

$$(70) \quad S_2^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = S_2^{(i)}(r_{12}),$$

míg a hárompontfüggvény

$$(71) \quad S_3^{(i)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = S_3^{(i)}(r_{12}, r_{13}, r_{23})$$

alakot vesz fel. A (71) kifejezés invariáns a jobb oldali függvényváltozók permutálására. Megemlíjtjük, hogy mind (70), mind (71) háromdimenziós, izotróp anyag esetén megkapható a kétdimenziós metszetből, amennyiben ez a sík végtelen (gyakorlati értelemben: elég nagy), továbbá (70) megkapható egyszimmetriás metszetből is. Általánosan viszont nem igaz, hogy egy n -pont-valószínűségi függvény $n \geq 2$ esetén kifejezhető lenne alacsonyabb rendű függvényekkel.

Geometriailag (70) értelmezhető úgy, mintha egy r_{12} hosszúságú szakaszt dobnánk a térfogatba véletlen helyekre, véletlen irányban, és a két végpontjában található fázisok statisztikája alapján számolnánk ki a függvény értékét. Ugyanígy (71) is r_{12} , r_{13} , és r_{23} oldalú háromszögek véletlen bedobásával kiértékelhető.

Azt mondjuk, hogy egy statisztikusan inhomogén rendszerben nincs hosszú távú rend, ha $r_{jk} \rightarrow \infty$ esetén a valószínűségi események statisztikusan függetlenek, azaz az n -pont-valószínűségi függvények szorzatalakba írhatók. Konkrétabban, hosszú távú renddel nem rendelkező, statisztikusan homogén anyagra az $n = 2$ és $n = 3$ esetekben az aszimptotikus értékek:

$$(72) \quad \lim_{r_{12} \rightarrow 0} S_2^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = f_i, \quad \lim_{r_{12} \rightarrow \infty} S_2^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = f_i^2,$$

valamint

$$(73) \quad \lim_{r_{12} \rightarrow 0, r_{13} \rightarrow 0} S_3^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = f_i, \quad \lim_{r_{23} \rightarrow 0} S_3^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = S_2^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1),$$

$$(74) \quad \lim_{r_{13} \rightarrow 0} S_3^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = f_i S_2^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1), \quad \lim_{r_{jk} \rightarrow 0} S_3^{(i)}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = f_i^3.$$

Levezethető továbbá, hogy a kétpontfüggvények kapcsolatosak a fázisok közötti felülettel, mégpedig háromdimenziós, kétfázisú, izotrop heterogén anyagra

$$(75) \quad S_2^{(i)}(r_{12}) = f_i - \frac{s}{4} r_{12} + \mathcal{O}(r_{12}^2),$$

ahol s a fajlagos felület, azaz az egységnyi térfogatra vonatkoztatott határfelület [26]–[27]. Megmutatható, hogy $S_2^{(i)}(r_{12})$ deriváltja az origóban tetszőleges dimenziószámú anyag esetén a fajlagos felülettel arányos, a gyakran előforduló $d = 1, 2, 3$ dimenziókra

$$(76) \quad \left. \frac{dS_2^{(i)}}{dr} \right|_{r=0} = \begin{cases} -s/2, & d = 1 \\ -s/\pi, & d = 2. \\ -s/4, & d = 3 \end{cases}$$

Azonban (76) csak akkor igaz, ha az r változó folytonos, nem diszkrét. Ezért, ha egy d dimenziószámú köbös rácson digitalizált anyagon akarjuk meghatározni a fajlagos felületet, ahol a távolságokat pixelben mérjük, és a $S_2^{(i)}(r)$ meredekségét is csak az $r = 0$ és $r = 1$ pontokban felvett értékéből számíthatjuk ki, akkor

$$(77) \quad \left. \frac{dS_2^{(i)}}{dr} \right|_{r=0} = \frac{S_2^{(i)}(1) - S_2^{(i)}(0)}{1} = -\frac{s}{2d},$$

ahol s most a felületek darabszámával kapcsolatos. Látható, hogy csak $d = 1$ esetén kapjuk vissza a (76) eredményt.

2.2.5 A térfogati hányad variabilitása

A heterogén anyagok, kompozitok egyik legfontosabb szerkezeti jellemzője a térfogati hányad. Az első ránézésre egyszerű tulajdonságot mégsem az elsők között tárgyaltuk, mivel sok

kapcsolatot mutat a többi szerkezetjellemzővel, és bizonyos szempontból nem is egyszerű a térfogati hányad értelmezése. E mennyiség egyik fő jellegzetessége, hogy statisztikusan homogén anyag esetén konstansnak kellene lennie (végtelen anyag), azonban térben lokálisan fluktuál (véges anyagterefogat). Ez utóbbi tulajdonsága azonban alapvető fontosságú mind a gyakorlatban, ahol csak véges méretű térfogatokot lehet vizsgálni, mind a reprezentatív térfogatelem problémájában.

Általánosan, ha statisztikusan homogén, ergodikus anyagban tekintünk egy v_0 térfogatú $V_0(\mathbf{r})$ teoretikus megfigyelési ablakot az \mathbf{r} helyen, és ezt az ablakot mozgatjuk az anyagban, az erre az ablakra meghatározott, az i -edik fázisra vonatkozó térfogati hányad változni fog. Ezt a $\phi_i(\mathbf{r})$ lokális térfogati hányadot valószínűségi változónak tekintve a

$$(78) \quad \phi_i(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{V_0} \int_{V_0(\mathbf{r})} I^{(i)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

térfogati integrállal definiálhatjuk. Fontos megjegyezni, hogy ez az érték függ a megfigyelési ablak alakjától és nagyságától. Határesetekben, ha az ablak infinitezimálisan kicsi, akkor $\phi_i(\mathbf{r})$ átmege az i -edik fázisra vonatkozó indikátorfüggvénybe

$$(79) \quad \phi_i(\mathbf{r}) \xrightarrow{v_0 \rightarrow 0} I^{(i)}(\mathbf{r}),$$

illetve ha az ablak végtelen nagy, akkor ergodikus rendszer esetén $\phi_i(\mathbf{r})$ a makroszkopikus térfogati hányadot adja:

$$(80) \quad \phi_i(\mathbf{r}) \xrightarrow{v_0 \rightarrow \infty} \langle I^{(i)} \rangle = f_i.$$

Továbbá $\phi_i(\mathbf{r})$ várható értéke az elvárásoknak megfelelően

$$(81) \quad \langle \phi_i \rangle = f_i.$$

A lokális fluktuációk mérőszámát a Lu és Torquato által bevezetett

$$(82) \quad C_i \equiv \frac{\sigma_{\phi_i}}{\langle \phi_i \rangle} = \frac{\sigma_{\phi_i}}{f_i}$$

szerkezeti durvasággal* jellemezhetjük [28], ahol

$$(83) \quad \sigma_{\phi_i}^2 = \langle \phi_i^2 \rangle - \langle \phi_i \rangle^2 = \langle \phi_i^2 \rangle - f_i^2$$

a ϕ_i varianciája. A C_i tehát mennyiségi jellemzést ad az i -edik fázissal való fedettség egyenetlenségéről az adott ablakméretre vonatkozóan. Általánosságban megadni C_i v_0 -tól való függését nem könnyű, azonban a határesetekben kétfázisú anyag esetén infinitezimálisan kicsi ablakméretre

$$(84) \quad C_1 = \frac{\sqrt{f_1 f_2}}{f_1},$$

* angolul coarseness

míg végtelen nagy ablakra

$$(85) \quad C_1 = 0.$$

Levezethető, hogy C_i kapcsolatos a kétponteloszlás függvényvel, mégpedig ergodikus anyag esetén

$$(86) \quad C_i = \frac{1}{f_i v_0} \sqrt{\int (S_2^{(i)}(\mathbf{r}) - f_i^2) v_2^{\text{int}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}},$$

ahol $v_2^{\text{int}}(\mathbf{r})$ két egymáshoz képest \mathbf{r} -rel eltolt adott alakú és méretű megfigyelési ablak átfedési térfogatát jelenti. Hosszútávú rend nélküli anyag esetén (86) integrandusában szereplő $S_2^{(i)}(\mathbf{r}) - f_i^2$ kifejezés 0-hoz tart nagy r esetén, ebből kifolyólag most korrelációs hosszúnak nevezzük és ℓ -lel jelöljük azt a távolságtartományt, amelyen belül ez a kifejezés nem elhanyagolható nagyságú. Ekkor ugyanis az ℓ -nél sokkal nagyobb karakterisztikus méretű ablak esetén $v_2^{\text{int}}(\mathbf{r})$ közelíthető $v_2^{\text{int}}(0) = v_0$ -lal. Ezáltal (86)

$$(87) \quad C_i \approx \frac{1}{f_i v_0^{1/2}} \sqrt{\int_{r < \ell} (S_2^{(i)}(\mathbf{r}) - f_i^2) d\mathbf{r}} \equiv K v_0^{-1/2}$$

alakban közelíthető, azaz nagy ablakméretek esetére egy aszimptotikus összefüggést kaptunk, ahol K pozitív konstans, valamint a (85) határeset láthatóan teljesül.

Megjegyezzük, hogy a (84)–(87) összefüggések általánosan d dimenziós szerkezetekre is érvényesek. Háromdimenziós esetben, a korrelációs hosszúnál nagyobb ablakméretek esetén C_i értékének a kocka alakú ablak lineáris méretének $-1,5$ -ik hatványával kell haladni.

2.3 Kompozitok rugalmas tulajdonságainak általános elméleti leírása

2.3.1 Az első közelítések: Voigt- és Reuss-féle rugalmassági határok

A heterogén anyagok szerkezeti tulajdonságain alapuló rugalmasságtani probléma bonyolult, és az elméleti megfontalásokból származó közelítések általában alsó és/vagy felső határok formájában fogalmazhatók meg. Az első ilyen jellegű közelítést Voigt adta [29], aki felső becslést adott arra, hogy kétfázisú anyagnak mekkora lehet a rugalmas állandója. (Valójában Voigt a keverék anyagok elektrosztatikus tulajdonságaival foglalkozott, azóta azonban a heterogén anyagok témakörében szokásos az elektromos és a mechanikai tulajdonságokra vonatkozó számításokat párhuzamosan végezni, mivel analóg módon számíthatók.) Azzal a feltevéssel számolt, hogy az anyagban mindenütt ugyanaz a deformáció van jelen. Később Reuss adott alsó becslést [30] a rugalmas tulajdonságokra, ő pedig azt feltételezte, hogy mindenhol azonos feszültség lép fel az anyagban. Szemléletesen ezeket a közelítéseket el lehet úgy is képzelni, mintha az összetevőket külön-külön terhelnék megegyező alakítással, illetve feszültséggel, majd a térfogati hányadok szerint összegeznék a keverék anyagra vonatkozó

rugalmas tulajdonságot. Azaz, mintha az egyes anyagdarabokat a függőleges présben egymás mellé „párhuzamosan”, illetve egymás tetejére „sorosan” helyezve terhelnénk. Ezen elvekből kapott C_{Reuss} és C_{Voigt} határok C_1 és C_2 rugalmassági modulusokkal (pl. térfogati rugalmassági modulus, nyírási modulus, Young-modulus) rendelkező anyagok f_V térfogati hányadú keverékének C_{eff} effektív rugalmas tulajdonságára:

$$(88) \quad \frac{1}{\frac{f_V}{C_1} + \frac{1-f_V}{C_2}} \equiv C_{\text{Reuss}} \leq C_{\text{eff}} \leq C_{\text{Voigt}} \equiv f_V C_1 + (1-f_V)C_2.$$

A XIX. és XX. század fordulója körül bevezetett Voigt- és Reuss-féle határok kizárólag az f_V térfogati hányadot tartalmazzák, mint szerkezeti paraméter, ugyanakkor nem tartalmaz a keverék anyag egyéb jellemzőire, szerkezetére, orientációjára, térbeli elrendeződésére vonatkozó paramétereket. Ebből nyilvánvalóan következik, hogy egymástól lényegesen különböző C_1 és C_2 tulajdonsággal rendelkező anyagok esetén igen távol eső határokat kapunk. Így felmerül az igény ennél jobban közelítő formulákra.

2.3.2 Hashin–Shtrikman-határok

Az 1960-as években új lendületet kapott a téma, amikor Hashin által bevezetett variációs elvek alapján [31] 1963-ban Hashin és Shtrikman vezetett le kváziizotropia és kváziizotrópnak tekinthető többfázisú anyagok esetére — mostanra már széleskörűen használt —, kellően szűk korlátokat az effektív rugalmassági együtthatókra az összetevők konkrét geometriai eloszlásától függetlenül [32]. A kváziizotropia kritérium azt jelenti, hogy ha tetszőleges anyagdarabot tekintünk a kompozitban, amely elég nagy az inhomogenitások méretéhez képest, és ugyanakkor kicsi az egész térfogathoz képest, akkor adott mennyiség (pl. elmozdulás, deformáció, feszültség vagy valamely fázis térfogati hányada) térfogati átlaga ugyanaz a test teljes térfogatára, mint a kiszemelt anyagdarabra nézve. Ugyanilyen értelemben beszélünk kváziizotrópnak tekinthető anyagról. (A kváziizotropia és kváziizotrópia megfelel a statisztikus homogenitás és statisztikus izotrópia fogalmának.) Korábban például Hashin csak bizonyos eloszlású gömb alakú beágyazott fázisok esetére tudott jó határokat adni [33], ezért fontos, hogy csupán ezeket a szerkezeti információkat használták ki a számításokban.

Tekintve egy n fázisú kompozitot, amelyben az r . fázis térfogati hányada f_r , térfogati rugalmassági modulusa K_r , valamint nyírási modulusa G_r , az anyag rugalmas energiájának variációjával a kompozit K_{eff} effektív térfogati rugalmassági modulusára vonatkozóan Hashin és Shtrikman a következő $K_{\text{alsó}}^{\text{HS}}$, $G_{\text{alsó}}^{\text{HS}}$ alsó határokat

$$(89) \quad K_{\text{alsó}}^{HS} = K_1 + \frac{\sum_{r=2}^n \frac{f_r}{1 + \frac{3}{3K_1 + 4G_1}}}{1 - \frac{3}{3K_1 + 4G_1} \sum_{r=2}^n \frac{f_r}{K_r - K_1 + \frac{3}{3K_1 + 4G_1}}},$$

$$(90) \quad G_{\text{alsó}}^{HS} = G_1 + \frac{\frac{\sum_{r=2}^n \frac{f_r}{1 + \frac{3(K_1 + 2G_1)}{5G_1(3K_1 + 4G_1)}}}{2(G_r - G_1) + 5G_1(3K_1 + 4G_1)}}{1 - \frac{3(K_1 + 2G_1)}{5G_1(3K_1 + 4G_1)} \sum_{r=2}^n \frac{f_r}{2(G_r - G_1) + \frac{3(K_1 + 2G_1)}{5G_1(3K_1 + 4G_1)}}},$$

valamint $K_{\text{felső}}^{HS}$, $G_{\text{felső}}^{HS}$ felső határokat

$$(91) \quad K_{\text{felső}}^{HS} = K_n + \frac{\sum_{r=1}^{n-1} \frac{f_r}{K_r - K_n + \frac{3}{3K_n + 4G_n}}}{1 - \frac{3}{3K_n + 4G_n} \sum_{r=1}^{n-1} \frac{f_r}{K_r - K_n + \frac{3}{3K_n + 4G_n}}},$$

$$(92) \quad G_{\text{felső}}^{HS} = G_n + \frac{\frac{\sum_{r=1}^{n-1} \frac{f_r}{1 + \frac{3(K_n + 2G_n)}{5G_n(3K_n + 4G_n)}}}{2(G_r - G_n) + 5G_n(3K_n + 4G_n)}}{1 - \frac{3(K_n + 2G_n)}{5G_n(3K_n + 4G_n)} \sum_{r=1}^{n-1} \frac{f_r}{2(G_r - G_n) + \frac{3(K_n + 2G_n)}{5G_n(3K_n + 4G_n)}}},$$

határozták meg, amelyekre:

$$(93) \quad K_{\text{alsó}}^{HS} < K_{\text{eff}} < K_{\text{felső}}^{HS} \quad \text{és} \quad G_{\text{alsó}}^{HS} < G_{\text{eff}} < G_{\text{felső}}^{HS}.$$

Itt feltételeztük, hogy K_1 , illetve G_1 a legkisebb és K_n , illetve G_n a legnagyobb rugalmassági modulus az n fázis közül. Speciálisan kétfázisú anyagra vonatkoztatva $n = 2$ behelyettesítésével az alsó határokra

$$(94) \quad K_{\text{alsó}}^{HS} = K_1 + \frac{f_2}{\frac{1}{K_2 - K_1} + \frac{3f_1}{3K_1 + 4G_1}},$$

$$(95) \quad G_{\text{alsó}}^{HS} = G_1 + \frac{f_2}{\frac{1}{G_2 - G_1} + \frac{6(K_1 + 2G_1)f_1}{5G_1(3K_1 + 4G_1)}},$$

valamint a felső határokra

$$(96) \quad K_{f_{\text{felső}}}^{HS} = K_2 + \frac{f_1}{\frac{1}{K_1 - K_2} + \frac{3f_2}{3K_2 + 4G_2}},$$

$$(97) \quad G_{f_{\text{felső}}}^{HS} = G_1 + \frac{f_1}{\frac{1}{G_1 - G_2} + \frac{6(K_2 + 2G_2)f_2}{5G_2(3K_2 + 4G_2)}}$$

adódik, és természetesen itt is $K_1 < K_2$ és $G_1 < G_2$. Érdeemes megjegyezni, hogy ha a két fázis nyírási modulusa megegyezik, akkor a térfogati rugalmassági modulusra kapott alsó és felső korlát egybeesik, azaz pontos eredményt ad az anyag effektív térfogati rugalmassági modulusára. Bizonyítható, hogy kétfázisú anyag esetén az adott feltételek mellett és az adott információk (fázisok modulusai és a térfogati hányad) felhasználásával nem adhatók jobb határok az anyag effektív modulusaira. Így az is látható, hogy további javítás csak további információk — mint például a fázisok eloszlásának statisztikus adatai — alapján lehetséges.

Az előzőekben csak a fontos eredményeket közöltük, a használt variációs elveket és számítási módszereket a 9.1.1 Függelékben foglaltuk össze.

2.3.3 Háromponthatárok

Az előbb említett Voigt- és Reuss-féle határok kezelhetőek akár úgy is, mint az egypont-korrelációs függvényekből származtatott határok, hiszen semmit nem tételeznek fel a kompozit szerkezetéről, még a statisztikus homogenitást és izotrópiát sem, csak a térfogati hányad és a modulusok az ismert információ. Willis később általánosságban is megmutatta, hogy a Hashin–Shtrikman-határok valójában kétpont-korrelációs függvényekből meghatározható határoknak (kétpont-határoknak) tekinthetők, mivel a statisztikus homogenitás és izotrópia miatt a kétpont-korrelációs függvények gömbszimmetriával rendelkeznek [34].

Beran és Molyneux a hárompont-korrelációs függvények használatával határoztak meg ennél szűkebb határokat (úgynevezett hárompont-határokat) [35]. 1981-ben Milton egyszerűsítette le jelentősen a Beran és Molyneux által megadott formulákat kétfázisú anyag esetén [36]. Eszerint bevezetve a $\langle a \rangle_f = f_1 a_1 + f_2 a_2$ és a $\langle \bar{a} \rangle_f = f_2 a_1 + f_1 a_2$ jelöléseket az alsó határookra

$$(98) \quad K_{\text{alsó}}^{BMM} = \frac{1}{\left\langle \frac{1}{K} \right\rangle_f - \frac{4f_1 f_2 \left(\frac{1}{K_1} - \frac{1}{K_2} \right)^2}{4 \left\langle \frac{1}{\bar{K}} \right\rangle_f + 3 \left\langle \frac{1}{G} \right\rangle_\zeta}}$$

$$(99) \quad G_{alsó}^{BMM} = \frac{1}{\left\langle \frac{1}{G} \right\rangle_f - \frac{f_1 f_2 \left(\frac{1}{G_1} - \frac{1}{G_2} \right)^2}{\left\langle \frac{1}{\tilde{G}} \right\rangle_f + 6\Xi}}$$

valamint a felső határokra

$$(100) \quad K_{felső}^{BMM} = \langle K \rangle_f - \frac{3f_1 f_2 (K_1 - K_2)^2}{3\langle \tilde{K} \rangle_f + 4\langle G \rangle_\xi}$$

$$(101) \quad G_{felső}^{BMM} = \langle G \rangle_f - \frac{6f_1 f_2 (G_1 - G_2)^2}{6\langle \tilde{G} \rangle_f + \Theta}$$

adódik, ahol

$$(102) \quad \Xi \equiv \frac{10\langle K \rangle_f^2 \left\langle \frac{1}{K} \right\rangle_\xi + 5\langle G \rangle_f \langle 3G + 2K \rangle_f \left\langle \frac{1}{G} \right\rangle_\xi + \langle 3K + G \rangle_f^2 \left\langle \frac{1}{G} \right\rangle_\eta}{\langle 9K + 8G \rangle_f^2},$$

$$(103) \quad \Theta \equiv \frac{10\langle G \rangle_f^2 \langle K \rangle_\xi + 5\langle G \rangle_f \langle 3G + 2K \rangle_f \langle G \rangle_\xi + \langle 3K + G \rangle_f^2 \langle G \rangle_\eta}{\langle K + 2G \rangle_f^2}.$$

A $\zeta_1 = 1 - \zeta_2$ és $\eta_1 = 1 - \eta_2$ olyan geometriai paraméterek, amelyek a $[0,1]$ intervallumba esnek, és

$$(104) \quad \zeta_1 \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{9}{2f_1 f_2} \int_{\Delta}^{\infty} dr \int_{\Delta}^{\infty} ds \int_{-1}^{+1} du \frac{Q_1(r, s, u)}{rs} P_2(u),$$

$$(105) \quad \eta_1 \equiv \frac{5\zeta_1}{21} + \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{150}{7f_1 f_2} \int_{\Delta}^{\infty} dr \int_{\Delta}^{\infty} ds \int_{-1}^{+1} du \frac{Q_1(r, s, u)}{rs} P_4(u),$$

ahol $Q_1(r, s, u)$ annak a valószínűsége, hogy a kompozitban egy tetszőlegesen választott $\arccos(u)$ szöveget bezáró r és s oldalú háromszög mindhárom csúcsa az 1-es jelzésű fázisban van. $P_2(u)$ és $P_4(u)$ a Legendre-polinomokat jelöli, azaz

$$(106) \quad P_2(u) = -\frac{1}{2} + \frac{3u^2}{2},$$

valamint

$$(107) \quad P_4(u) = \frac{3}{8} - \frac{15u^2}{4} + \frac{35u^4}{8}.$$

2.3.4 Anizotróp határok

Az alábbiakban röviden szeretnénk kitérni az anizotróp kompozitokra elméleti úton kapott határookra, a teljesség igénye nélkül, csak azokat a legfontosabb eredményeket fogjuk ismertetni, amelyeket a későbbiekben is használni fogunk.

A Hashin–Shtrikman-határokat Walpole egységesített formában (lásd 9.1.2 Függelék) újra levezette statisztikusan homogén és izotróp kompozitra, de tetszőleges lokális geometria esetén, amikor minden fázis izotróp [37], illetve amikor a fázisok tetszőlegesen anizotróp tulajdonságokkal rendelkeznek [38]; majd kitért a mátrixba ágyazott transzverzálisan izotróp, hengeres (korong, illetve tű) alakú erősítőfázisok határainak tárgyalására egyirányú, illetve véletlenszerűen irányított elrendeződés esetén [39]. Ezekben a számításokban Walpole csak a határeseteket vizsgálta, azaz csak arra használta a beágyazott fázis alakját, hogy leegyszerűsítse a problémát az éleffektusok elhanyagolásával. Azonban ez nem alkalmazható olyan esetekben, amikor például repedések vannak az anyagban, ahol a repedések élei igen fontosak. Walpole munkáját 1977-ben Willis úgy általánosította, hogy az egyirányba orientált, ellipszoid alakú beágyazott fázisok pontos alakját vette figyelembe, és ebben az esetben határozta meg a kompozitok rugalmas határait [34]. Willis másik igen lényeges általánosítása, az volt, hogy bevezette a korrelációs függvényeket a határok meghatározásának számítási módszerébe (lásd részletesebben 9.1.3 Függelék). Ezek az elméletileg jelentős határok valójában akkor váltak gyakorlatban is alkalmazhatóvá, amikor Weng 1994-ben explicit módon kifejezte ezeket a határokat transzverzálisan izotróp kompozitokra, amelyekben egyirányban álló beágyazott fázisok vannak, és a korrelációs függvény forgásellipszoid-szimmetriával rendelkezik. Ebben a csoportba tartozhatnak például az egyirányban álló azonos forgásellipszoid alakú beágyazott fázisokat tartalmazó többfázisú kompozitok is.

Tekintsünk egy kompozit anyagot, amelyben n különböző beágyazott fázist tartalmaz a mátrix! Jelölje az r -edik fázis rugalmasságyűthető-tenzorát L_r és térfogati hányadát f_r ($r = 1, 2, \dots, n$), míg az $n+1$ indexszel jelölt mátrix rugalmasságyűthető-tenzorát L_{n+1} és térfogati hányadát f_{n+1} . (Megjegyezzük, hogy mátrix nélküli anyag esetén, mint például egy polikristály, az $f_{n+1} = 0$ értéket kell figyelembe venni.) Általánosságban az anyag adott pontján értelmezett σ' feszültségtenzort a ϵ' deformációtenzor függvényében megadó $\sigma' = L' \epsilon'$ lineáris összefüggés alapján továbbá bevezetjük az úgynevezett viszonyítási anyagot (lásd bővebben 9.1.2 Függelék), amely az az L_0 rugalmasságyűthető-tenzorral jellemezhető homogén anyag, amellyel az anyag adott helyén értelmezett τ' feszültségpolarizációs tenzor így definiálható:

$$(108) \quad \tau' = (L' - L_0) \epsilon',$$

azaz

$$(109) \quad \sigma' = L_0 \epsilon' + \tau'.$$

Ekkor a transzverzálisan izotróp esetekben az ε átlagos deformációtenzor és a σ átlagos feszültségtenzor kapcsolatát leíró szokásos

$$(110) \quad \sigma = L\varepsilon$$

egyenlet Hill munkája [40] alapján kifejezhető komponensenként:

$$(111) \quad \frac{1}{2}(\sigma_{22} + \sigma_{33}) = k(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + l'\varepsilon_{11},$$

$$(112) \quad \sigma_{11} = l(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + n\varepsilon_{11},$$

$$(113) \quad \sigma_{22} = 2m(\varepsilon_{22} - \varepsilon_{33}),$$

$$(114) \quad \sigma_{23} = 2m\varepsilon_{23}, \quad \sigma_{12} = 2p\varepsilon_{12}, \quad \sigma_{13} = 2p\varepsilon_{13},$$

ha az 1-es jelzésű tengely a szimmetriatengely. Az L rugalmassági tenzort a Hill [41] és Walpole [39] által használt rövidített jelölésmód szerint az előbbi kifejtés paramétereivel így írhatjuk:

$$(115) \quad L = (2k, l, l', n, 2m, 2p).$$

Ha az L tenzor diagonális szimmetriával rendelkezik, azaz $L_{ijk} = L_{kij}$, akkor $l = l'$, és a kifejezés tovább egyszerűsödik:

$$(116) \quad L = (2k, l, n, 2m, 2p).$$

Általános esetben ez a diagonális szimmetria nem teljesül az Eshelby által ellipszoid alakú beágyazott fázisok esetén levezetett S -tenzorra [42], amely így az előbbi jelölésekkel a következő komponensekből áll:

$$(117) \quad S_0 = (S_{2222} + S_{2233}, S_{1122}, S_{2211}, S_{1111}, S_{2323}, S_{1212}),$$

amelyek izotróp mátrix esetén csak a viszonyítási anyag ν_0 Poisson-számától és a beágyazott fázis $\alpha = a/b$ hosszúság-átmérő arányától (karcsúság) függenek, ahol a és b rendre a forgásellipszoidok szimmetriatengelyének irányába eső, illetve a transzverzális síkban lévő féltengelyét jelöli. Ezeket a komponenseket kifejezhetjük Federico és munkatársai munkája [43] alapján:

$$(118) \quad S_{1111} = \frac{1}{2(1-\nu_0)} \left[1 - 2\nu_0 + \frac{3\alpha^2 - 1}{\alpha^2 - 1} - \left(1 - 2\nu_0 + \frac{3\alpha^2}{\alpha^2 - 1} \right) g(\alpha) \right],$$

$$(119) \quad S_{2222} = S_{3333} = \frac{3}{8(1-\nu_0)} \frac{\alpha^2}{\alpha^2 - 1} + \frac{1}{4(1-\nu_0)} \left(1 - 2\nu_0 + \frac{9}{4(\alpha^2 - 1)} \right) g(\alpha),$$

$$(120) \quad S_{2233} = S_{3322} = \frac{1}{4(1-\nu_0)} \left[\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2 - 1)} - \left(1 - 2\nu_0 + \frac{3}{4(\alpha^2 - 1)} \right) g(\alpha) \right],$$

$$(121) \quad S_{2211} = S_{3311} = -\frac{1}{2(1-\nu_0)} \frac{\alpha^2}{\alpha^2 - 1} + \frac{1}{4(1-\nu_0)} \left(\frac{3\alpha^2}{\alpha^2 - 1} - (1 - 2\nu_0) \right) g(\alpha),$$

$$(122) \quad S_{1122} = S_{1133} = -\frac{1}{2(1-\nu_0)} \left[1 - 2\nu_0 + \frac{1}{\alpha^2 - 1} - \left(1 - 2\nu_0 + \frac{3}{2(\alpha^2 - 1)} \right) g(\alpha) \right],$$

$$(123) \quad S_{2323} = \frac{1}{4(1-\nu_0)} \left[\frac{\alpha^2}{2(\alpha^2-1)} + \left(1 - 2\nu_0 - \frac{3}{4(\alpha^2-1)} \right) g(\alpha) \right],$$

$$(124) \quad S_{1212} = S_{1313} = \frac{1}{4(1-\nu_0)} \left[1 - 2\nu_0 + \frac{\alpha^2+1}{\alpha^2-1} - \frac{1}{2} \left(1 - 2\nu_0 - \frac{3(\alpha^2+1)}{\alpha^2-1} \right) g(\alpha) \right],$$

ahol a g segédfüggvény csak az α karcsúságtól, azaz a beágyazott fázis alakjától függ:

$$(125) \quad g(\alpha) = \begin{cases} \left[\alpha(1-\alpha^2)^{-3/2} \right] \left[\arccos(\alpha) - \alpha(1-\alpha^2)^{1/2} \right] & \alpha \in [0,1[\\ \left[\alpha(\alpha^2-1)^{-3/2} \right] \left[\alpha(\alpha^2-1)^{1/2} - \arccos h(\alpha) \right] & \alpha \in]1,\infty[\end{cases}$$

Ezek a komponensek gömb alakú beágyazott fázisok, azaz $\alpha = 1$ esetén szingulárisak, ekkor az $\alpha \rightarrow 1$ határértéket kell alkalmazni. Az r indexszel jelölt fázisra (a mátrixszal egyetemben) úgy szintén felírható:

$$(126) \quad L_r = (2k_r, l_r, n_r, 2m_r, 2p_r),$$

és mivel mindegyik anyag izotróp, ezek a szokásos K_r térfogati rugalmassági és G_r nyírási modulusokkal a

$$(127) \quad k_r = K_r + \frac{1}{3}G_r, \quad l_r = K_r - \frac{2}{3}G_r, \quad n_r = K_r + \frac{4}{3}G_r, \quad m_r = p_r = G_r$$

alakban fejezhető ki:

Ezek felhasználásával Weng a következő határokat vezette le:

$$(128) \quad \bar{k} = \frac{1}{q} \left[\sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r(k_r d^{(r)} - l_r g^{(r)})}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s c^{(s)}}{l^{(s)}} + \sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r(l_r c^{(r)} - 2k_r h^{(r)})}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s g^{(s)}}{l^{(s)}} \right],$$

$$(129) \quad \bar{l} = \frac{1}{q} \left[\sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r(l_r d^{(r)} - n_r g^{(r)})}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s c^{(s)}}{l^{(s)}} + \sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r(n_r c^{(r)} - 2l_r h^{(r)})}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s g^{(s)}}{l^{(s)}} \right],$$

$$(130) \quad \bar{n} = \frac{1}{q} \left[\sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r(n_r c^{(r)} - 2l_r g^{(r)})}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s d^{(s)}}{l^{(s)}} + 2 \sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r(l_r d^{(r)} - n_r g^{(r)})}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s h^{(s)}}{l^{(s)}} \right],$$

$$(131) \quad \bar{m} = \sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r m_r}{e^{(r)}} \left(\sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s}{e^{(s)}} \right)^{-1},$$

$$(132) \quad \bar{p} = \sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r p_r}{f^{(r)}} \left(\sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s}{f^{(s)}} \right)^{-1},$$

ahol bevezettük a

$$(133) \quad q \equiv \left[\sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r d^{(r)}}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s c^{(s)}}{l^{(s)}} - 2 \sum_{r=1}^{n+1} \frac{f_r g^{(r)}}{l^{(r)}} \sum_{s=1}^{n+1} \frac{f_s h^{(s)}}{l^{(s)}} \right]$$

és a

$$(134) \quad c^{(r)} = 1 + \frac{2(k_r - k_0)}{E_0} [(1 - \nu_0)(S_{2222} + S_{2233}) - 2\nu_0 S_{2211}] + \frac{2(l_r - l_0)}{E_0} [(1 - \nu_0)S_{1122} - \nu_0 S_{1111}],$$

$$(135) \quad d^{(r)} = 1 + \frac{n_r - n_0}{E_0} [S_{1111} - 2\nu_0 S_{1122}] + \frac{2(l_r - l_0)}{E_0} [(1 - \nu_0)S_{1122} - \nu_0 S_{1111}],$$

$$(136) \quad e^{(r)} = 1 + \frac{2(m_r - m_0)}{m_0} S_{2323},$$

$$(137) \quad f^{(r)} = 1 + \frac{2(p_r - p_0)}{p_0} S_{1212},$$

$$(138) \quad g^{(r)} = \frac{2(k_r - k_0)}{E_0} [(1 - \nu_0)S_{1122} - \nu_0 S_{1111}] + \frac{l_r - l_0}{E_0} [S_{1111} - 2\nu_0 S_{1122}],$$

$$(139) \quad h^{(r)} = \frac{n_r - n_0}{E_0} [S_{2211} - \nu_0 (S_{2222} + S_{2233})] + \frac{l_r - l_0}{E_0} [(1 - \nu_0)(S_{2222} + S_{2233}) - 2\nu_0 S_{2211}],$$

$$(140) \quad l^{(r)} = c^{(r)} d^{(r)} - 2g^{(r)} h^{(r)},$$

jelöléseket, ahol E_0 a viszonyítási anyag Young-modulusát jelöli. (Megjegyezzük, hogy míg a \bar{k} , \bar{n} , \bar{m} , \bar{p} mennyiségek határok, az \bar{l} mennyiség nem tekinthető határnak.) Ezek a határok egybeesnek a Hashin és Shtrikman [32], a Hill [40] és Hashin [44], és a Walpole [39] által levezetett határokkal, amennyiben az α értéke rendre 1, ∞ , illetve 0. Érdeemes megjegyezni továbbá, hogy a Walpole által elhanyagolt éleffektusok hatása jól tanulmányozható ezeken a határokon [45]. Ezekkel a mennyiségekkel kifejezhetőek a mérnöki gyakorlatban hagyományosan használt rugalmas állandók, mint például az

$$(141) \quad E_{11} = \bar{n} - \frac{\bar{l}^2}{k}$$

a szimmetriatengely irányába eső Young-modulus, vagy a

$$(142) \quad \nu_{12} = \frac{\bar{l}}{2k}$$

a szimmetriatengely irányában végzett deformáció hatására történő harántösszehúzódást jellemző Poisson-szám.

2.4 A reprezentatív térfogatelem meghatározása

Az előzőekben említett elméletileg jószolt határok csak elegendően nagy anyagminta esetén érvényesek. Azonban a tomografikus mérések, illetve a végelem szimulációk csak igen korlátos méretű anyagminta vizsgálatát teszik lehetővé. Részletesen kell foglalkoznunk azzal, hogyan lehet a fizikailag reprezentatív térfogatelem méretét meghatározni, amelyen azt a legkisebb anyagtérfogatot értjük, amelyik már rendelkezik a kompozitra makroszkopikusan jellemző fizikai tulajdonságokkal. Ezt a problémát a szakirodalomban alapvetően két módon — elméleti és kísérleti úton — közelítik meg, és kritériumokat fogalmaznak meg a reprezentatív térfogatelemre. Az elméleti megközelítések [46] főként az idealizált szerkezetekre lettek kidolgozva, és két alapvetően különböző szemléletet tükröznek:

(i) A reprezentatív térfogatelemnek elegendően nagyoknak kell lenni, hogy ténylegesen tartalmazhasson minden lehetséges mikroszerkezeti konfigurációból egy mintavételt, amely a kompozitban előfordulhat.

(ii) A helyben változó anyagi tulajdonságokkal rendelkező legkisebb reprezentatív térfogatelemnek akkorának kell lenni, hogy statisztikus értelemben az anyag átlagos viselkedését mutassa, azaz kicserélhető legyen olyan homogén anyaggal, amely konstans anyagi tulajdonságokkal rendelkezik. (Itt a hangsúly az átlagos viselkedésen van.)

A kísérleti megközelítések [47] inkább a mérési körülményeket próbálják figyelembe venni:

(iii) A reprezentatív térfogatelem mechanikai tulajdonságainak függetlennek kell lenni a peremfeltételektől (például deformációvezérelt vagy feszültségvezérelt terhelés), miközben egyetlen mintán végzünk méréseket.

(iv) Több, legalább reprezentatív térfogatelem méretű mintán végzett mérések során nem mérhető szórás az effektív tulajdonságokban.

Az (i) kritérium valódi részecskeerősítésű kompozitok esetén a rendezetlen szerkezete miatt nyilván nem alkalmazható hatékonyan, mivel igen nagy reprezentatív térfogatelemet definiálna, viszont szabályosabb (például periodikus) szerkezetek esetén már jóval kisebb méretet adhat (a példa szerint az elemi cellát). A (ii) kritérium már nem az anyag belsejében lévő részletekre (szerkezet, feszültségtér, elmozdulástér) összpontosít, inkább az átlagos viselkedést helyezi előtérbe, és ez az elméleti számítások során is jól formalizálható. A (iii) kritérium hasznos lehet, ha kevés minta áll rendelkezésre a vizsgálatokhoz, míg a (iv) kritérium a (ii) kritérium kísérleti analógiájának tekinthető: statisztikusan az effektív tulajdonságokat kell visszakapni sok, esetleg kisebb méretű mintával, mint amit a (iii) kritérium adna. (Természetesen a (iv) kritériumban elvárt zérus szórást kísérleti értelemben kell venni.)

2.4.1 A reprezentatív térfogatelem minimális méretének kvantitatív becslése

Drugin és Willis kvantitatív becslést adott a (ii) kritériumot alapul véve a kétkomponensű kompozitok minimális reprezentatív térfogatelem méretére [46], amelyre teljesül, hogy a (110) nemlokális konstitutív egyenlet szerinti σ átlagos feszültség az ε átlagos deformációval olyan kapcsolatban van, amelyet az L konstans rugalmassági tenzor ír le, és ebben az értelemben az L tenzor jellemzi a kompozit makroszkopikus rugalmas válaszát. Az elv, ami alapján becsülhetővé válik a minimális reprezentatív térfogatelem, azon alapul, hogy a Hashin–Shtrikman-féle variációs elv Fourier-transzformációval kiegészített általánosított levezetését [48] felhasználva, az L tenzor megadható. Majd ezen keresztül vizsgálható, hogy a sokaságátlagból képzett, hely szerint változó $\varepsilon(x)$ deformációs tér hogyan befolyásolja ezt, azaz a helybeni változás milyen hullámhosszánál fog a kompozit konstitutív egyenletében lévő nemlokális tag a lokális tag mellett nem elhanyagolható korrekciót előidézni. Ebből származtatható egy kvantitatív becslés a reprezentatív

térfogatelem minimális méretére, amelyet Drugan és Willis arra az esetre határozott meg, amelyre a nemlokális konstitutív egyenletet is explicit formában le tudta vezetni, azaz olyan kétfázisú kompozitra, amelyben az izotróp mátrixot véletlen térbeli eloszlású, izotróp, azonos átmérőjű, nem átlapoló, gömb alakú részecskék erősítik (vagy gyengítik). Nyilvánvaló, hogy ebben a megközelítésben egy α hibakorlátot is meg kell adnunk, amely azt jelzi, hogy milyen pontosan várjuk el az anyag konstitutív válaszának közelíthetőségét a nemlokális konstitutív egyenlettel, továbbá nyilvánvaló, hogy a különböző típusú terhelésektől függően különböző méreteket (hullámhosszakat) kaphatunk, ezért ezt két speciális alakítás esetén — az alakítás irányában változó normális deformáció (I_N) és a nyírási síkban változó nyírási deformáció (I_S) hatására — fellépő konstitutív válaszra számították ki:

$$(143) \quad I_N = 2\pi a \left| \frac{3f_1(1-f_1)^2(2-f_1)(D_1+2D_2)}{5\alpha(1+2f_1)(3K_L+4G_L)} \right|^{1/2},$$

valamint

$$(144) \quad I_S = \pi a \left| \frac{f_1(1-f_1)^2(2-f_1)D_2}{5\alpha(1+2f_1)G_L} \right|^{1/2},$$

ahol a részecskék sugara a , az r -edik fázis térfogati hányada f_r , továbbá

$$(145) \quad D_1 \equiv 8G_0\delta G(3K_0+4G_0) \frac{5(3K_0+4G_0)[2\delta G(3K_0+8G_0)-21\delta K G_0]-12f_2\delta K\delta G(3K_0+G_0)}{21(3f_2\delta K+3K_0+4G_0)[5G_0(3K_0+4G_0)+6f_2\delta G(K_0+2G_0)]^2},$$

$$(146) \quad D_2 \equiv \frac{-20G_0(\delta G)^2(3K_0+4G_0)(3K_0+8G_0)}{7[5G_0(3K_0+4G_0)+6f_2\delta G(K_0+2G_0)]^2},$$

$$(147) \quad K_L \equiv \frac{K_0(3K_1+4G_0)+4f_1G_0\delta K}{3K_1+4G_0-3f_1\delta K},$$

$$(148) \quad G_L \equiv G_0 \frac{G_0(9K_0+8G_0)(1-f_1)+3K_0G_1(2+3f_1)+4G_0G_1(3+2f_1)}{5G_0(3K_0+4G_0)+6(1-f_1)\delta G(K_0+2G_0)},$$

ahol $\delta K = K_1 - K_0$ és $\delta G = G_1 - G_0$ egyszerűsítő jelölést használtuk. A 0 index ebben az esetben is a viszonyítási anyagot jelöli, ehelyütt célszerűen a 2-es fázisra vonatkozó konstansokat kell behelyettesíteni a viszonyítási anyag paramétereiként. Megjegyezzük, hogy K_L és G_L éppen az explicit megoldása a nemlokális, konstans effektív modulussal felírt konstitutív egyenletnek egy sokkal általánosabb esetben, ahol a kétfázisú kompozit izotróp eloszlásban tartalmazza a tetszőleges alakú és tetszőlegesen anizotróp fázisokat, azaz az izotróp esetben használatos Hill-féle szimbolikus jelölésmóddal:

$$(149) \quad L = (3K_L, 2G_L).$$

A reprezentatív térfogatelem méretére vonatkozó eredmények összehasonlításából az adódik, hogy azonos hibahatárok esetén a nyírási és a normális alakításhoz tartozó méreteket összehasonlítva a normális irányú alakítás esetén szignifikánsan nagyobb méreteket kapunk.

2.4.2 Az általunk vizsgált kompozittra vonatkozó Drugan–Willis-becslések

Drugan és Willis — $\alpha = 5\%$ -os hibakorlátot előírva a 20%-os térfogati hányadban Al_2O_3 anyagú, gömb alakú egyező méretű, véletlen eloszlású részecskéket tartalmazó, alumíniummátrixú kompozit esetére kiértékelve a reprezentatív térfogatelem méretére vonatkozó (143) és (144) becsléseket — azt kapta, hogy rendre a részecskeátmérő 1,15-szoros, illetve 0,77-szoros adódik a minimális reprezentatív térfogatelem lineáris méretére normális, illetve nyírási deformáció esetén, míg az esetünkben tapasztalt $\alpha = 2\%$ -os hibakorlátra kiértékelve a kifejezéseket rendre 1,84-szoros, illetve 1,24-szoros átmérőre vonatkoztatott relatív méretet kaptunk. Azaz megállapíthatjuk, hogy ez az elméleti becslés az adott anyagszerkezeti körülmények esetén igen kis reprezentatív térfogatot jósol. Drugan és Willis ezeket az értékeket még kiszámította más típusú erősítőfázisra (üregek és merev gömbök esetére), valamint különböző térfogati hányadok esetére is, és ugyanerre a következtetésre jutottak. Azaz rendre 1 és 2 közötti, illetve 0,5 és 1,1 közötti értéket kaptak $\alpha = 5\%$ -os hibakorlát esetén, melyet jó pontosságú korlátnak neveztek, míg $\alpha = 1\%$ -os nagy pontosságú hibakorlát esetén is legfeljebb 4,5-szeres gömbátmérő körüli méretet kaptak. Továbbá megállapították, hogy az említett esetekben körülbelül $f_1 \approx 25\%$ térfogati hányad esetén éri el ez a faktor a maximumát. Másrészt azt is megállapították, hogy a szélsőséges esetek (üregek, illetve tökéletesen merev gömbök) feltételezése mindig nagyobb méretet ad a minimális reprezentatív térfogatelemre, mint a kevésbé szélsőséges feltételek alkalmazása.

2.4.3 Numerikus módszerekkel történő becslések

Guisev — Drugan és Willis munkája alapján — Monte Carlo-szimulációval előállított azonos, izotróp, gömb alakú részecskéekkel előállított izotróp mátrixú, kétfázisú, periodikus kompozitmodelleket vizsgált végelemmódszerrel [49]. Mivel véges számú gömböt helyezett be véges méretű térfogatba, ezért végesméret-effektusok fordultak elő, valamint a keletkezett modell anizotrópiát mutatott. A különböző darabszámú (1, 8, 27 és 64 darab) gömböket tartalmazó modelleket úgy állította elő, hogy a térfogati hányadok állandó legyen. A modellszámításokból arra a következtetésre jutott, hogy már elég néhány gömböt vizsgálni egy térfogatban ahhoz, hogy nagyon jó becsléseket lehessen adni az egyes rugalmas állandókra, mivel a mennyiségek szórása még Drugan és Willis elméleti becslésénél is gyorsabban csökkent. Már 8 gömb behelyezésével 3%-os, illetve 7%-os szórást mutattak a Young-, illetve a nyírási modulusokra kapott becslések az átlagos érték körül. Tehát az általa vizsgált szerkezetek esetén az úgynevezett homogenizáció rendkívül gyors. Ennek a váratlan eredménynek az a valószínű magyarázata, hogy ebben a vizsgálatban a térfogati hányad állandó értéken volt tartva, míg nagyméretű szerkezetekből különböző helyekről kivágott térfogatok esetén elkerülhetetlen a térfogati hányad variabilitása a szerkezeti változatosság miatt, és az ilyen véges méretű modellekre jóval nagyobb szórás adódik.

Másrészt periodikus határfeltételt alkalmaztak a modellekben, amely kevert határfeltételnek felel meg, és úgyszintén az egyébként lehetséges szórást csökkentő hatással bír.

2.5 Kompozitok alakítási tulajdonságainak leírása

A kompozitok lineáris rugalmassági együtthatóinak becslésén túl szükséges a nemlineáris tulajdonságok leírása is. A képlékeny tulajdonságokat többféleképpen közelítik meg, de alapvetően már csak numerikusan, főként végeelemmodellek segítségével lehet tárgyalni. A végeelemmodellek felállításához elsősorban a háromdimenziós szerkezet feltérképezését kell elvégezni, amelyet tipikusan vagy az eredeti szerkezetet roncsoló csiszolással előállított kétdimenziós szeletek összefűzésével* [50], vagy pedig a mi esetünkben is alkalmazott roncsolásmentes röntgentomográfias eljárással (4. fejezet) lehet felépíteni, majd e szerkezet fizikai jellemzését megadni és ez alapján modellezni (pl. [51]–[52]).

A végeelemmodellek felépítésénél nem csak a geometriai tényező játszik fontos szerepet, hanem az alkotókat leíró anyagmodellek helyes megválasztása. Mivel az anyagok komplex, minden részletre kiterjedő matematikai leírása még makroszkopikus skálán homogénnek tekinthető anyagok esetén sem lehetséges, ezért a modell szempontjából nélkülözhetetlen tulajdonságok közelítő leírására kell törekedni. Léteznek igen alacsony szinten, így egészen apró erősítőfázisok (diszperzoidok) leírására felállított anyagmodellek, amelyek a diszlokációk mozgását is figyelembe veszik és ezen keresztül időbeli, dinamikus leírást is adhatnak az alakításról. Ezzel lehetővé téve például a kúszási tulajdonságok vizsgálatát [53], vagy akár a kristályképlékenység szintjén történő mikrofeszültségi vizsgálatokat [54]. A magasabb méretskálára való áttérést gyakran az úgynevezett Voronoi-cellás végeelemmodellekkel valósítják meg [53], amely az aszimptotikus homogenizálási módszerrel kiegészítve hatékony kontinuumleírást tesz lehetővé részecskeerősítésű kompozitok esetén [55]–[57]. A kontinuumközelítések a nagyobb (néhány mikron feletti) részecskékkel erősített kompozitok leírására már alkalmasak.

A végeelemmodellek diszkrétizáltságból fakadó hibáit is mindig szem előtt kell tartani: a végeelemmodellek érzékenyek lehetnek mind a peremfeltételekre, mind az elemek alakjára, méretére és anyagi tulajdonságaira. Fokozottabban ügyelni kell e hatásokra, ha nagy a heterogén szerkezet alkotói közötti mechanikai kontraszt. Részletes elemzést Ostoja-Starzewski és Ilies [58], valamint Maire és munkatársai [59] végeztek erre vonatkozóan.

Az irodalomban a kompozitok mechanikai viselkedésének becslésére sok esetben úgynevezett egységcellamodelleket alkalmaznak, amelynek egyik alapfeltevése, hogy a részecskék egyenletesen oszlanak el a mátrixban, és eszerint egy átlagos részecske külső terhelésre adott válaszával közelíthető a kompozit makroszkopikus viselkedése [60]–[62]. Ehhez

* angol nevén: serial sectioning method

elengedhetetlen a szerkezet részletes statisztikus jellemzése, kiemelkedően a szemcsék alakjára vonatkozóan [63]–[51].

A már említett részecskecsoportosulás hatásainak modellezése is fontos feladat a kompozitok területén. Christman és munkatársai [64] viszont vizkerekert tartalmazó kompozitokra azt kapta, hogy részecskecsoportosulás jelenléte erőteljesen csökkentheti a folyásfeszültséget. Corbin és Wilkinson [65] a részecskeeloszlás hatásainak tanulmányozásakor a csoportosulásokban elhelyezkedő gömbrészecskék esetén nagyobb folyásfeszültséget kapott, mint egyenletes eloszlás esetén. Prangnell és munkatársai [66] megmutatták, hogy mindez azért lehetséges, mert a képlékeny alakítás a csoportokban nehezen jöhet létre, mivel az ekvivalens feszültség lecsökken a csoportok magjában, míg a csoportra vett átlagos hidrosztatikai feszültségkomponens megnő. Erre vonatkozólag még Estevez és munkatársai [67] végeztek háromdimenziós becsléseket és azt találták, hogy nyújtási terhelés esetén a részecskecsoportosulások növelik a mechanikai szilárdságot, ugyanakkor a részecskecsoportosulásokban keletkezhetnek először repedések, és ez gyakorlatilag az anyag hamar bekövetkező gyengüléséhez vezet. Összességében tehát arra lehet következtetni, hogy az idealizált szabályos elrendeződésű kompozitokhoz képest az általában részecskecsoportosulást mutató valódi kompozitok magasabb folyásfeszültséget mutatnak. Erre építve Borbély és munkatársai [13] kétdimenziós többrészecskés egységcellamodelleikben figyelembe vették a valódi kompozit szerkezetanalíziséből a részecskék mérete, orientációja és helye között kapott korrelációkat, és a valódi anyag esetére is alátámasztották ezeket a megállapításokat, valamint az alakítási keményedést jelölték meg a folyásfeszültség-növekedés okaként.

A kompozitok modellezésénél fontos megemlíteni az előállításkor a hőmérsékleti hatások miatt visszamaradó belső feszültségeket a mátrixban és az erősítőfázisban. Ugyanígy az állandó hőmérsékleten terhelt majd visszaterhelt kompozitban is maradó feszültségek vannak. Ezek jelenléte olykor első közelítésben elhanyagolható, azonban alkalmat is ad arra, hogy alkalmas mérési módszerrel ellenőrizhető legyen a végeselemmodell által adott jóslat. Povirk és munkatársai [68] részletes vizsgálatukban axiszimmetrikus egységcellamodellekkel megmutatták, hogy már a lehető legegyszerűbb izotróp keményedési modell alkalmazásával is jó becsléseket lehet adni az egytengelyű alakítás irányában a belső feszültségekre, valamint a termikusan visszamaradó belső feszültségek is jól leírhatók. Azonban az alakítás irányára merőlegesen ezekkel a modellekkel nem lehetett jó közelítéseket elérni.

Böhm és Han összehasonlította [69], hogy a többrészecskés egységcellamodellek esetén a két- és háromdimenziós, egyenletes eloszlású merevgömbökkel történő megvalósítások egytengelyű terhelés esetén jelentős különbséget adtak a rugalmas, és különösen a képlékeny tartományban. Ezért kellő óvatosságra intenek a kétdimenziós modellek használatakor, és amikor csak lehetséges a háromdimenziós modelleket részesítik előnyben. Továbbá az is kiderült, hogy míg a rugalmas állandókat viszonylag kicsi, az irodalomban megadott méretű modellek alapján

lehet becsülni, a képlékeny alakítás leírásához már nem elégséges ekkora térfogat, valamint a kompozit mikrogeometriájának részletesebb ismerete szükséges. Mindezek figyelembevételével vizskereket tartalmazó kompozitokat is sikerült ilyen viszonylag egyszerű közelítésekkel modellezni [70].

A valódi szerkezet mechanikai csiszolással történő kétdimenziós szeletek összefűzésével kapott feltérképezése alapján felépített háromdimenziós végeelemmodellekkel Chawla és munkatársai [71] azt kapták Al alapú 20% SiC erősítésű kompoziton, hogy a háromdimenziós mikroszerkezeten alapuló modell mind rugalmas állandók tekintetében, mind 2%-os deformációig sokkal jobb közelítést ad, mint az egy gömbrészecskét, és valamivel jobb közelítést ad, mint az egy hasábrészecskét tartalmazó egységcellamodellek. Megjegyezzük, hogy ez a közlemény nem tesz említést részletes szerkezetanalízisről, és arról, hogy hogyan választották ki az egyetlen számításához felhasznált mikroszerkezeti mintát, és az mennyiben tekinthető reprezentatívnak.

A fémátrixú kompozitok végeelemmodellezésével foglalkozó irodalom hatalmasra nőtt, ugyanis igen nagy az érdeklődés az anyagkárosodás modellezésére, mivel ennek van a legnagyobb gyakorlati haszna. Most kizárólag az értekezés szempontjából legfontosabb irodalmakat említettük. A kompozitok mechanikai tulajdonságaira vonatkozó további kutatási eredmények vonatkozásában az irodalomra utalunk [72].

3 A végelelem módszer

3.1 A módszer elve

Ebben az alfejezetben röviden összefoglaljuk a végelelem módszer fizikai alapjait és számítási módszereit, szigorúan csak a jelen értekezéshez szükséges mértékben kifejtve. Bővebb tárgyalásra itt nincs lehetőségünk, ezért a szakirodalomra utalunk [73], [74].

3.1.1 Diszkretizáció

Ha felírjuk egy kontinuummechanikai probléma differenciálegyenleteit a megfelelő határfeltételekkel, akkor alapvetően kétféle megközelítési mód kínálkozik a számítógéppel történő numerikus megoldásra. Vagy véges differenciákkal közelítjük a differenciálmennyiségeket, és így oldjuk meg az egyenletrendszer, vagy ehelyett inkább a megoldást diszkretizáljuk úgy, hogy a térfogatot osztjuk fel véges méretű elemekre, és ezen elemekre próbálunk egy konzisztens megoldást meghatározni, illetve az egyes elemekre adódó megoldást a belső fizikai kényszereknek megfelelően. Azaz elegendő alapvető, ismert geometriájú esetekre (a végelemekre) megoldani a mechanikai alapproblémát, a bonyolult geometriájú, összetett feladat már ezen „alapkövekből” felépíthetővé válik. A végelelem módszer egyik nagy előnye ez a moduláris felépíthetőség, és így a bonyolult határfeltételek kezelhetősége a végesdifferenciálmódszerhez képest.

Tegyük fel, hogy külső erők hatnak egy véges elem n csomópontjára, ekkor az $\tilde{\mathbf{F}}$ általánosított erővektort és az ennek megfelelő $\tilde{\mathbf{u}}$ általánosított elmozdulásvektort a következőképpen írhatjuk:

$$(150) \quad \tilde{\mathbf{F}} \equiv (F_1^1 \ F_2^1 \ F_3^1 \ F_1^2 \ \dots \ F_1^n \ F_2^n \ F_3^n)^T = (\mathbf{F}^1 \ \mathbf{F}^2 \ \dots \ \mathbf{F}^n)^T,$$

$$(151) \quad \tilde{\mathbf{u}} \equiv (u_1^1 \ u_2^1 \ u_3^1 \ u_1^2 \ \dots \ u_1^n \ u_2^n \ u_3^n)^T = (\mathbf{u}^1 \ \mathbf{u}^2 \ \dots \ \mathbf{u}^n)^T,$$

ahol u_i^ξ , illetve F_i^ξ a ξ -edik csomópontban történő \mathbf{u}^ξ elmozdulás, illetve ható \mathbf{F}^ξ erő i -edik komponensét jelöli. (Ezentúl $\tilde{\mathbf{v}}$ -mal jelöljük a \mathbf{v}^ξ csomóponti vektorokhoz tartozó előzőekben leírt értelemben általánosított vektort, és kiterjesztjük ezt a jelölést mátrixokra is.) Ezeket a mennyiségeket a

$$(152) \quad \tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{K}^* \tilde{\mathbf{u}}$$

merevségi egyenlet kapcsolja össze, ahol \mathbf{K}^* az úgynevezett merevségi mátrix, amelyet a véges elem konkrét modellje határoz meg. Ha a véges elemet nem a saját kanonikus koordináta-rendszerében kezeljük, akkor ezt az egyenletet a globális koordináta-rendszerbe át kell transzformálni:

$$(153) \quad \tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{K} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{T}^T \mathbf{K}^* \mathbf{T} \tilde{\mathbf{u}},$$

ahol \mathbf{T} a transzformációs mátrix, amely általában egy forgatást valósít meg. Mind a \mathbf{K} , mind a \mathbf{T} $3n \times 3n$ -es mátrix. Ezek után kihasználva a szuperpozíció elvét az egyes elemekre kapott merevségi egyenleteket összesítve egy komplex modellben megkaphatjuk az erők ismeretében az ismeretlen elmozdulásokat.

3.1.2 Variációs elvek a végelelem módszerhez

Vegyünk egy véges elemekre osztott anyagi térfogatot és vizsgáljuk meg az

$$(154) \quad I = W_{\text{külső}} - U$$

funkcionál

$$(155) \quad \delta I = \delta W_{\text{külső}} - \delta U,$$

variációját, ahol $W_{\text{külső}}$ a külső erők által végzett munka, és U a deformációs energia. A szuperpozíció elvét felhasználva azt mondhatjuk, hogy a variációs problémát elemenként is megoldhatjuk, azaz vizsgáljuk az egyes elemekre felírt

$$(156) \quad \delta I_e = \tilde{\mathbf{F}} \delta \tilde{\mathbf{u}} - \int_V \boldsymbol{\sigma} \delta \boldsymbol{\varepsilon} dV$$

variációt, ahol az adott elemre a csomópontban ható $\tilde{\mathbf{F}}$ erők munkájának és a $\boldsymbol{\sigma}$ feszültségtér hatására keletkező deformációs energiának a variációját fejtettük ki, és a $\boldsymbol{\sigma}$ és $\boldsymbol{\varepsilon}$ mennyiségeket a Voigt-féle jelölésrendszerben fogjuk használni ebben a fejezetben. Egyensúly esetén

$$(157) \quad I = \sum I_e$$

összegnek szélsőértéke van, ha minden elemre

$$(158) \quad \delta I_e = 0.$$

A (156)-ban szereplő $\delta \tilde{\mathbf{u}}$ elmozdulás- illetve $\delta \boldsymbol{\varepsilon}$ deformációvariációt azonban még össze kell kapcsolnunk, ezért ez utóbbit még ki kell fejezni az elmozdulás függvényében, amit polinomfüggvénnyel történő közelítéssel valósíthatunk meg. A polinomoknak legalább annyi tagjának kell lenni, ahány szabadsági foka van az adott elemnek. Ennek megfelelően egy alkalmas közelítő $\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ függvenymátrix és a polinomokhoz tartozó állandókat tartalmazó $\tilde{\mathbf{a}}$ együtthatóvektor segítségével felírt

$$(159) \quad \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) \tilde{\mathbf{a}}$$

folytonos elmozdulástér meghatározásához először állítsuk elő az elem n darab csomópontjában megadható

$$(160) \quad \tilde{\mathbf{u}}_e = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^1 \\ \mathbf{u}^2 \\ \vdots \\ \mathbf{u}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{P}(\mathbf{r}^1) \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}^2) \\ \vdots \\ \mathbf{P}(\mathbf{r}^n) \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{a}} \equiv \mathbf{G} \tilde{\mathbf{a}},$$

általánosított csomóponti elmozdulásvektort, ahol \mathbf{u}^ξ az elem \mathbf{r}^ξ helyen lévő ξ -edik csomópontjának elmozdulásvektora. (160) alapján az ismert elmozdulásokból és az alkalmazott polinomiális közelítésből az együtthatóvektor meghatározható:

$$(161) \quad \tilde{\mathbf{a}} = \mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{u}}_e,$$

majd alkalmazva a (159) egyenletre az

$$(162) \quad \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r})\mathbf{G}^{-1}\tilde{\mathbf{u}}_e \equiv \mathbf{N}(\mathbf{r})\tilde{\mathbf{u}}_e$$

adódik, ahol $\mathbf{N}(\mathbf{r})$ az úgynevezett formafüggvény vagy alakfüggvény, amely kapcsolatot teremt a csomóponti elmozdulások és a folytonos elmozdulástér között. A (162) elmozdulástér ismeretében már kiszámíthatjuk az

$$(163) \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{D}\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}\mathbf{N}(\mathbf{r})\tilde{\mathbf{u}}_e \equiv \mathbf{B}(\mathbf{r})\tilde{\mathbf{u}}_e$$

deformációt, ahol \mathbf{D} -vel jelöltük azt a differenciáloperátort, amely előállítja az adott reprezentáció esetén a deformációtenzor komponenseit. A csomóponti $\tilde{\mathbf{u}}_e$ elmozdulásvektorból az elem deformációjának variációja (163) alapján már felírható

$$(164) \quad \delta\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}(\mathbf{r})\delta\tilde{\mathbf{u}}_e,$$

és így az elemre vonatkozó variáció kifejezésében (163)–(164) eredményeket és a (11) rugalmas konstitutív egyenletet kihasználva

$$(165) \quad \delta I_e = \tilde{\mathbf{F}}\delta\tilde{\mathbf{u}} - \int_{V_e} L(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0)\mathbf{B}(\mathbf{r})\delta\tilde{\mathbf{u}} dV = \left(\tilde{\mathbf{F}} + \int_{V_e} L\varepsilon_0\mathbf{B}(\mathbf{r})dV - \int_{V_e} L(\mathbf{B}(\mathbf{r})\mathbf{u}_e)\mathbf{B}(\mathbf{r})dV \right) \delta\tilde{\mathbf{u}}$$

alakú kifejezést kapunk, amelyből (158) alapján

$$(166) \quad \tilde{\mathbf{F}} + \int_{V_e} \mathbf{B}^T(\mathbf{r})L\varepsilon_0 dV = \left(\int_{V_e} \mathbf{B}^T(\mathbf{r})L\mathbf{B}(\mathbf{r})dV \right) \mathbf{u}_e$$

kifejezéshez jutunk, amelyből leolvasható az elem \mathbf{K}_e merevségi mátrixa, és a megoldandó

$$(167) \quad \tilde{\mathbf{F}} + \tilde{\mathbf{F}}_0 = \mathbf{K}_e\mathbf{u}_e$$

merevségi egyenlet. Látható, hogy az egyenletben az $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ saját deformáció egy további erőtagot jelent. Az erők és a merevségi mátrix ismeretében a csomóponti elmozdulások megkaphatók. A végelemek összerésítésekor az érintkező csomópontokban elő kell írni ugyanazt az elmozdulást, és az így felépített egyenletrendszerrel kell megoldani. Megjegyezzük, hogy az előbbi variációs elv a virtuális munka elvével és a potenciális energia minimumának elvével egyenértékű.

Hasonló számítást lehet végigkövetni az úgynevezett virtuális feszültség elvén keresztül is, amely analóg a minimális komplementer energia elvével. Ekkor nem az elmozdulástér szerinti variációkat vizsgáljuk, hanem a feszültségek szerintit, valamint a merevségi egyenlet helyett analóg módon a

$$(168) \quad \mathbf{H}\mathbf{F}_e = \mathbf{u}_e$$

hajlékonysági egyenletet kapjuk, ahol \mathbf{H} a hajlékonysági mátrix. Ebben az esetben a csomóponti elmozdulások és a hajlékonysági mátrix ismeretében megkaphatóak a csomóponti erők.

Megjegyezzük, hogy amennyiben variációs elvből vezetünk le diszkretizált végeelem-egyenleteket, mindig szimmetrikus mátrixot kapunk.

Fontos következmény továbbá, hogy a végeelem módszer közelítő volta, másrészt a numerikus pontatlanságok miatt az elmozdulásvariációs változat szerint a nemlineáris problémák esetén szükséges minimumkeresés mindig túlbecslő megoldást ad, azaz várhatóan kisebb elmozdulást ad adott külső erők esetén, mint a valódi pontos megoldás, tehát a próbatest „keményebbnek” mutatkozik. A feszültségvariációnál éppen fordítva, nagyobb erőket ad adott elmozdulás esetén, mint a pontos megoldás, tehát a próbatest „puhábbnak” látszódik.

3.1.3 Interpolációs függvények, normált koordináták

Az előzőekben nem részleteztük, hogy a csomóponti elmozdulásokat és az elemen belüli elmozdulásteret milyen közelítéssel kapcsoljuk össze, csak azt említettük, hogy tipikusan polinomialis interpolációval történő közelítést alkalmazunk. Ezeket a közelítő függvényeket tartalmazza az $\mathbf{N}(\mathbf{r})$ formafüggvény. Ezek konkrét alakja függ az elem dimenziójától (1, 2, vagy 3 dimenziós véges elem), alakjától (pl. rúd, háromszög, négyszög, tetraéder, téglatest), csomópontjainak elhelyezkedésétől (egyszerű, finomított, centrált), valamint azoktól a határfeltételektől, amelyeket teljesítenie kell (például folytonosság a határon, deriváltakra vonatkozó feltételek). Másik szempont ezek megválasztásánál az adott interpolációs függvény alkalmazásából fakadó számításgigény és pontosság mérlegelése, ezért szokás lineáris polinomokat használni a számításgigény csökkentése, vagy ennél magasabb fokú polinomokat használni a pontosság növelése érdekében. Általános esetekben a dimenziószám emelkedésével beszélünk lineáris, bilineáris és trilineáris, illetve kvadratikus, bikvadratikus és trikvadratikus interpolációs függvényekről (ritkább esetben akár köbös függvényekről is). Típusukat tekintve szokásosan Lagrange-, vagy Hermite-féle interpolációs alappolinomok alapján építik fel a teljes interpolációs függvényt. A felépítésnél figyelembe kell venni, hogy például egy eredetileg négyzet alakú elem csomópontjai deformáció közben elmozdulnak, és egy eltorzult négyszög lesz belőle, ennek kezelésére vezetik be az úgynevezett normált koordinátákat — minden helykoordinátát az aktuális szélsőpontokhoz képesti relatív (azaz 0 és 1 közötti) koordináta szerint határoz meg —, amelyek szerint mindig beazonosítható, hogy az eredeti szabályos végeelem melyik pontjához tartozik a torzult elem egy pontja. Ezzel a koordinátatranszformációval tehát a szabályos végeelemen felépített interpolációs függvényt tudjuk alkalmazni a torzult elemre is. Ez a probléma különösen szembeötlő lehet finomított végeelemeknél, ahol a végeelem csúcsaiban lévő csomópontok között is van csomópont, deformált esetben általában már nem is beszélhetünk — a példánál maradva — négyszögről, hanem egy általános nyolcszögge torzul az elem, ha egyetlen osztópont van az oldalak mentén két csúcspont között.

3.1.4 Numerikus integrálás

Szorosan az interpolációs függvények alkalmazásához kapcsolódik, hogy a (166)-ban választó térfogati integrált minden egyes elemre numerikusan ki kell számítani a merevségi mátrix felépítésekor. A torzult, vagy „görbült” elemre nézve ez komoly geometriai nehézségeket is jelenthet, viszont normált koordinátákkal automatikusan könnyen paraméterezhető az alakzat, míg az integrandus kiértékelése valamivel számításgényesebbé válik, hiszen be kell építeni még ezt a koordinátatranszformációt is. Tehát a

$$(169) \quad \mathbf{K}_e = \int_{V_e} \mathbf{B}^T(\mathbf{r}) \mathbf{L} \mathbf{B}(\mathbf{r}) dV \equiv \int_{V_e} f(x, y, z) dx dy dz$$

típusú integrálokat

$$(170) \quad \mathbf{K}_e = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{f}(\xi, \eta, \zeta) \det \mathbf{J} d\xi d\eta d\zeta \equiv \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \hat{g}(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta$$

alakú normált koordináták szerinti integrálással alakíthatjuk át, ahol \mathbf{J} a koordinátatranszformációból képzett Jacobi-mátrix. A kellő pontosságú számítások gyorsítása érdekében Gauss–Legendre-kvadraturák alkalmazásával számítjuk ki ezeket az integrálokat, ahol a módszer lényege, hogy nem kell numerikus rácson integrálni ezeket a függvényeket, hanem az interpolációs függvény néhány alkalmas helyen (integrációs pont) vett helyettesítési értékének súlyozott összegéből tudjuk megadni az integrál értékét:

$$(171) \quad \mathbf{K}_e = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m w_i w_j w_k \hat{g}(\xi_i, \eta_j, \zeta_k),$$

ahol m az egy irányban vett integrációs pontok számát (tipikus értéke 1 vagy 2), és w az egyes integrációs ponthoz tartozó súlyokat (értékét előre kiszámolt táblázatokból veszik) jelöli [73].

3.1.5 Hibaforrások, szuperkonvergens pontok

A végeeselem módszer elsődleges hibaforrása a diszkretizációból adódó hiba^{*}, azaz a csúcspontokban meghatározott mennyiségek és a valódi megoldás közötti eltérés. Ha sorbafejtjük adott p rendű az elmozdulásra vonatkozó $\hat{\mathbf{u}}$ valódi megoldást az ξ -edik csúcspont körül

$$(172) \quad \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}^\xi) + \nabla \hat{\mathbf{u}}|_{\mathbf{r}^\xi} (\mathbf{r} - \mathbf{r}^\xi) + \dots + \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

akkor a végeeselem h karakterisztikus méretével skálázva p fokszámú interpolációs polinomot alkalmazva az elmozdulások hibája $\mathcal{O}(h^{p+1})$. Ez azt jelenti, hogy ha egy lineáris interpolációt ($p = 1$) alkalmazó végeeselemmodell térbeli felbontását kétszeres sűrűségűre változtatjuk, azaz h -t felére csökkentjük, akkor a hiba negyedére csökken. Ez ugyanúgy igaz minden nulladrendben meghatározott mennyiségre is, az m -edik rendű deriváltként származtatható mennyiségek (pl.

^{*} További hiba még a véges számábrázolásból fakadó numerikus pontatlanság, amely a mai számítógépes lehetőségek mellett az alkalmazásokban elhanyagolható.

deformáció, feszültség esetén $m = 1$) hibáját pedig $\mathcal{O}(h^{p+1-m})$ nagyságúnak becsülhetjük. Látható, hogy magasabb fokszámú interpolációval jóval pontosabb eredményt kaphatunk, ugyanakkor a számítások költsége is megnő a szabadsági fokok számának növekedése miatt. Azt lehet mondani, hogy a szabadsági fokok száma (s) közelítően h^{-d} szerint skálázik (d a dimenziószám), tehát az előbbi hiba $\mathcal{O}(s^{-(p+1-m)/d})$ szerint változik. Végelelem módszer esetén a közelítés konvergenciájáról abban az értelemben beszélünk, hogy a sorfejtési tagok számát növelve a megoldás hibája csökken, és a konvergencia fokának nevezzük az előbbi hibakifejezésekben a h kitevőjét. Érdemes itt megjegyezni, hogy a p növelése szerinti konvergencia általában gyorsabb, mint a h csökkentése szerinti konvergencia. Speciális problémákon tesztelve ezt az eredményt az adódik, hogy sokszor az elméleti becslésnél lassabban konvergálnak a végelelem-számítások. Ennek oka a nagy deformáció- vagy feszültséggradiens okozta szingularitások, ezért bevezették az adott modellben a szingularitás intenzitását jellemző λ számot, amellyel a konvergenciát $\mathcal{O}(s^{-\min[\lambda, (p+1-m)]/d})$ jellemzi.

Azonban lehetnek a végelelemen belül olyan speciális pontok, ahol a valódi megoldás éppen megegyezik az interpolált megoldással. Ha ezeket a pontokat ismernénk, akkor ezeken a helyeken lenne érdemes meghatározni az elmozdulás, deformáció, feszültség értékét. Általánosságban sajnos ez a probléma nem megoldható, azonban lehetséges bizonyos szempontokból optimális pontokat találni. Optimálisnak nevezzük azokat a pontokat, amelyekben az adott mennyiségre a legpontosabb értéket kaphatjuk, és szuperkonvergensnek nevezzük, ha az ebben a pontban tapasztalható konvergencia legalább egy fokkal gyorsabb, mint egyébként az adott polinom esetén várható lenne. Az elmozdulásra nézve a csomópontok optimálisak, ugyanakkor a deriváltakra nézve az elem valamely belső pontjai lesznek optimálisak.

Belátható, hogy egydimenziós esetben a Gauss–Legendre-kvadratúrák helyei szuperkonvergens pontok az elsőrendű deriváltakra nézve. Ez általánosítható többdimenziós elemekre is, ahol az interpolációs függvény polinomok szorzataként kezelhető. Bár a Gauss–Legendre-féle kvadratúrapontok optimálisak, a szuperkonvergencia nem mindig teljesül. Például háromszögelemek esetén nincsenek szuperkonvergens pontok, csak optimális pontok vannak. Továbbá a szuperkonvergencia az elemek torzulása esetén is elveszhet. Ennek ellenére a Gauss–Legendre-pontok kedvező tulajdonságait általánosan kihasználjuk a végelelem módszerben.

3.1.6 Megújítás, SPR, REP, a megoldás hibája

Ha meg tudjuk határozni a végelelem bizonyos pontjaiban pontosabban a feszültséget, akkor felmerül az igény, hogy ez alapján a végelelem többi részén is — például a csomópontokban — pontosabban határozzuk meg, ezt az eljárást megújításnak nevezik. Ezután ha

a csomópontokban ismertek az úgynevezett megújított feszültségértékek ($\tilde{\sigma}_e^*$), akkor az elemen belüli $\tilde{\sigma}^*(\mathbf{r})$ feszültségeket az elmozdulásnál használt interpolálással kapjuk:

$$(173) \quad \tilde{\sigma}^*(\mathbf{r}) = \mathbf{N}(\mathbf{r})\tilde{\sigma}_e^*.$$

Egyik lehetséges megközelítés azonnal adódik is, extrapolációval állítsuk elő a csomóponti feszültségeket a Gauss–Legendre-féle pontok értékét felhasználva. Más, bonyolultabb próbálkozások után azonban a szuperkonvergens pontokban kapott értékek polinomiális simításával valóban lényegesen javított eredményeket lehetett elérni, a módszer neve az angol elnevezés alapján SPR^{*}, azaz szuperkonvergens csoportokkal történő megújítás [75]–[77].

Az SPR módszer lényege, hogy ha p fokú interpolációs polinomokat alkalmazó végeselemeket használunk, akkor a szuperkonvergens pontokban a feszültségre nézve a konvergencia foka $p+1$, nem pedig p , mint egyéb helyeken, azaz az elmozdulással azonos konvergenciájú. Ekkor p fokszámú polinomiális simítást végezhetünk, azaz ha vesszük szomszédos végeselemek egy csoportját úgy, hogy azokban legalább $p+1$ szuperkonvergens pont legyen, akkor ezekre a pontokra a legkisebb négyzetek módszerével p fokú polinomot illesztve a csomópontokban megkapjuk szuperkonvergensen a $\tilde{\sigma}_e^*$ feszültséget, majd (173) segítségével az egész végeselemben is, hiszen a formafüggvény is p fokú polinomokra épül. Szokás kiterjeszteni az SPR módszert az elmozdulások megújítására is, ehhez azonban szükségessé válhat nagyobb elemcsoportokat venni, ezért ezt inkább csak dinamikai problémák esetén alkalmazzák. Az SPR módszerhez tehát ismernünk kell a szuperkonvergens pontokat a végeselemben belül, azonban ez az információ nem mindig áll rendelkezésre, és nem ismert, hogy miért működik jól akkor is, amikor ilyen szuperkonvergens pontok nem is léteznek.

Az SPR módszerrel analóg másik megközelítés a REP[†] módszer, azaz megújítás a végeselemcsoportok egyensúlyának helyreállításával [78]–[79], amely lényege, hogy mivel a végeselemmódszer eredményeként kapott feszültség nem lesz folytonos a végeselemek határán, ezért ismét szomszédos végeselemcsoportokat választva sima és folytonos feszültségfüggvényekkel helyettesítjük ezeken belül a feszültségeket, megoldva rájuk a (9) egyensúlyi egyenletet. Majd ez alapján pedig az SPR-hez hasonló módon meghatározzuk a csomópontbeli $\tilde{\sigma}_e^*$ feszültségértékeket és (173) alapján interpoláljuk a végeselemre. A REP módszer hatalmas előnye, hogy nem kell hozzá a szuperkonvergens pontok létezésének, illetve helyének az ismerete.

A megújítási módszerek egyik fő alkalmazása az *a posteriori* hibabecslések kiszámítása. Hibák elméleti becslését szokásosan az $\|\mathbf{e}\| \equiv \|\mathbf{u} - \hat{\mathbf{u}}\|$ kifejezéssel definiáljuk, ahol \mathbf{u} a pontos, míg $\hat{\mathbf{u}}$ a végelelemszámításból kapott elmozdulás, és az úgynevezett energianormát kifejtve

* Superconvergent Patch Recovery

† Recovery by Equilibration of Patches

$$(174) \quad \|\mathbf{e}\| \equiv \left(\int_V (\mathbf{D}\mathbf{e})^T L(\mathbf{D}\mathbf{e}) dV \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\int_V (\boldsymbol{\varepsilon} - \hat{\boldsymbol{\varepsilon}})^T L(\boldsymbol{\varepsilon} - \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}) dV \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\int_V (\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}})^T L^{-1}(\boldsymbol{\sigma} - \hat{\boldsymbol{\sigma}}) dV \right)^{\frac{1}{2}}$$

adódik, ahol ismét a kalapos mennyiségek a számított értékeket jelentik. Azonban a pontos mennyiségeket általában nem tudjuk, ezért az $\|\mathbf{e}\| \approx \|\bar{\mathbf{e}}\| = \|\mathbf{u}^* - \hat{\mathbf{u}}\|$ közelítést használjuk, ahol \mathbf{u}^* a megújításból származó elmozdulás. Az ilyen típusú eljárást megújítás alapú hibabecsléseknek nevezik [80]. A hibabecslés pontossága és a minősége az úgynevezett hatékonysági indexszel mérhető, amelyet $\theta \equiv \|\bar{\mathbf{e}}\|/\|\mathbf{e}\|$ definiál, és amelyre a Zienkiewicz és Zhu által megfogalmazott tétel [76] értelmében igaz az

$$(175) \quad 1 - \|\mathbf{e}^*\|/\|\mathbf{e}\| \leq \theta \leq 1 + \|\mathbf{e}^*\|/\|\mathbf{e}\|$$

összefüggés. Ennek legfontosabb következménye, hogy ha a megújításból származó megoldás gyorsabban konvergál, mint a végeselemből kapott megoldás, akkor minden esetben aszimptotikusan pontos becslést kapunk. Ez azt jelenti, hogy ha az eredeti megoldás p fokú formafüggvénnyel leírható, azaz az energianorma szerinti hiba nagysága $\|\mathbf{e}\| = \mathcal{O}(h^p)$, továbbá a megújításból kapott megoldás gyorsabban konvergál, azaz $\|\mathbf{e}^*\| = \mathcal{O}(h^{p+\alpha})$, akkor a (175) határok az

$$(176) \quad 1 - \mathcal{O}(h^\alpha) \leq \theta \leq 1 + \mathcal{O}(h^\alpha)$$

szerint alakulnak. Ekkor ha $h \rightarrow 0$, akkor $\theta \rightarrow 1$, tehát a becslés aszimptotikusan pontos, azaz a hibabecslés a valódi hibához konvergál.

E fontos tulajdonságot nem minden esetben mutatja a másik fő módszer, a maradék alapú hibabecslés, vagy reziduális hiba. Az eljárás lényege, hogy az eredeti rugalmasságtani differenciálegyenletet a megfelelő határfeltételekkel felírjuk mind a pontos, mind a végeselemre kapott megoldásokkal egy kiszemelt végeselemre. Majd a két egyenletet kivonva egymásból a különbségi problémát kapjuk, azaz az úgynevezett maradékra (reziduálisra) kapunk a megoldások különbségét szerepeltető differenciálegyenletet, amelyet nem tudunk megoldani, mivel a határfeltételekben is megjelenik a pontos megoldásból adódó tag. Ezért a határfeltételekben a pontos megoldást a megújításból kapott megoldással helyettesítjük, és így közelítjük a különbségi probléma megoldását. Ennek a közelítő megoldásnak az energianormáját hívjuk a végeselem maradékhiba-becslésének. Ez lehetőséget ad arra, hogy a végeselemmodellben a lokális hibát megbecsüljük, és a megoldást addig finomítsuk, amíg egy bizonyos érték alá nem csökken ez a hiba, így a gyakorlatban is jól használható a módszer. Terjedelmi okokból nem fejtjük ki részletesebben a módszert és annak több válfaját, hanem az irodalomra utalunk [81]–[83]. Megjegyezzük, hogy annak megválaszolása még mindmáig megoldatlan, hogy a megújítás utáni megoldásban mekkora a maradék hiba [73].

3.1.7 Szimmetriák szerepe, határfeltételek

A végeelemmodell felépítésénél érdemes figyelembe venni a modellezendő próbatest szimmetriáit, mivel ezek felismerésével jelentősen csökkenthetjük a probléma megoldásához szükséges számítások mennyiségét. Tipikusan sokat segíthet a tükörszimmetria vagy forgásszimmetria létezése. Ugyanis a tükörsík (vagy tükörtengely) két oldalán az elmozdulástér, és így a deformációs és feszültségtér is, követi a szimmetriát, míg a forgástengely körül hengersizmetrikusak a terek. Ebből következően — most csak a tükörszimmetriával foglalkozva — felesleges kiszámítani a teljes térfogatban a feszültségtérrel, elegendő csak a tükörsík (tükörtengely) egyik oldalát modellezni, és az újonnan keletkezett szabad felületre (vonalra) egy tükör-határfeltételt előírni, azaz az ott levő csomópontok csak a tükörsík (tükörtengely) mentén mozdulhatnak csak el.

Másik fontos eset, amikor végtelen anyagdarabot szeretnénk modellezni, amelyből természetesen csak egy véges anyagdarabot tehetünk be a végeelemmodellbe. A végtelen anyag minden kivágott anyagdarabja homogén deformáció esetén egyformán viselkedik, azonban ez az eltolási szimmetria nem érvényes az elmozdulástérre, csak a deformációs térre. A végeelemekre viszont elsődlegesen elmozdulási megkötéseket célszerű tenni, mivel ezek közvetlenül csökkentik a szabadsági fokok számát. Ezért kihasználva azt a tulajdonságot, hogy homogén deformáció esetén az anyaghoz rögzített kezdetben síkfelületek (egyenesek) a deformáció során síkfelületek (egyenesek) maradnak, az eltolási szimmetriát úgy érvényesíthetjük, hogy a kivágási felületeken lévő csomópontok elmozdulásait „egymáshoz kötjük”, azaz egyenlővé tesszük őket. Általánosabban szokás ezt a határfeltételt megkövetelni akkor is, ha a homogén deformáció nem teljesül pontosan.

Az elmozdulásokra vonatkozó határfeltételeket szokás kinematikus határfeltételeknek nevezni. Azonban sokszor nem kerülhető el, hogy a csomópontokban az erőket vagy a felületeken a feszültségeket szabjuk meg. Ekkor dinamikus határfeltételekről beszélünk.

3.1.8 Képlékeny alakítás kezelése, nemlineáris megoldás

Láttuk, hogy (153) alapján lineáris konstitutív egyenletek esetén egy

$$(177) \quad \tilde{\mathbf{F}} - \mathbf{K}\tilde{\mathbf{u}} = 0$$

típusú lineáris egyenletet kell megoldanunk, azonban képlékeny alakítás során ezt egy

$$(178) \quad \Psi(\tilde{\mathbf{u}}) \equiv \tilde{\mathbf{F}} - \tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{u}}) = 0$$

típusú nemlineáris egyenlet váltja fel, amelyben $\tilde{\mathbf{R}}$ jelöli a nemlineáris konstitutív egyenletből származó, elmozdulásparaméterektől függő tagot. Az ilyen egyenletek megoldására iteratív algoritmusokat szoktak használni, például a Newton–Raphson-módszert.

Mivel ezen egyenleteknek több megoldásuk is lehetséges, ezért különösen fontos, hogy egy ismert megoldásból apró szimulációs lépésekkel haladjunk a kívánt megoldás felé, és így a

következő lépésben mindig valódi megoldás közeléből indítható az iteratív egyenletmegoldó algoritmus. A szimulációs lépéseket lehet időléptetéssel, vagy erőléptetéssel kezelni, függően attól, hogy milyen típusú határfeltételekkel definiáltuk a modellt. Tehát az $n+1$ -edik lépésben a megoldandó egyenlet

$$(179) \quad \Psi(\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}) = \tilde{\mathbf{F}}_{n+1} - \tilde{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}) = 0$$

alakú, amely megoldási algoritmusát az n -edik lépés megoldásából indítjuk. A Newton–Raphson-módszernél ez úgy történik, hogy az első iterációs lépésben a kiinduló paraméter

$$(180) \quad \tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^1 = \tilde{\mathbf{u}}_n,$$

ahol a felső index az iteráció sorszámát jelöli, és $\tilde{\mathbf{u}}_n$ az előző szimulációs lépés konvergált megoldása. Ugyanezzel a jelöléssel az i -edik iterációs lépésben a (179) egyenletet első rendben közelíthetjük a

$$(181) \quad \Psi(\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^{i+1}) \approx \Psi(\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^i) + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{\mathbf{u}}} \right)_{n+1}^i d\tilde{\mathbf{u}}_n^i = 0$$

formulával, ahol a Jacobi-mátrix éppen a merevségi mátrixnak szerkezetileg megfelelő

$$(182) \quad \mathbf{K}_T = \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{\mathbf{u}}} = - \frac{\partial \tilde{\mathbf{R}}}{\partial \tilde{\mathbf{u}}}$$

értőt adja. Ennek segítségével a következő iterációs lépéshez a paraméterterbeli lépést a

$$(183) \quad d\tilde{\mathbf{u}}_n^i = \mathbf{K}_T^{-1} \Psi_n^i$$

kifejezés adja meg, amellyel

$$(184) \quad \tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^{i+1} = \tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^i + d\tilde{\mathbf{u}}_{n+1}^i = \tilde{\mathbf{u}}_n^i + \sum_{k=1}^i d\tilde{\mathbf{u}}_n^k$$

lesz a következő iterációs lépés kiindulópontja. A Newton–Raphson-módszer gyorsan konvergál, azonban szokásos kritikája, hogy nagy a számításgéneve, mert minden lépésnél újra ki kell számítani a \mathbf{K}_T mátrixot. Javításként azt a közelítést alkalmazzák, hogy a \mathbf{K}_T mátrixot csak egyszer számítják ki az iterációs lépések kezdetekor, és ezzel a konstans mátrixszal végzik el a többi iterációt. Ezt az eljárást módosított Newton–Raphson-módszernek nevezik.

3.2 A módszer megvalósítása az MSC.Marc/Mentat programmal

Az MSC.Marc/Mentat programokat mind tudományos, mind ipari feladatok végeelem-analízisére tervezték. Más elterjedten használt programoktól eltérően nem csak lineáris, kis deformációs analízisre, hanem nemlineáris képlékeny analízisre is alkalmas, mind geometria, mind anyagtulajdonság szempontjából.

A programcsomag MSC.Marc tagja [21] tartalmazza a végeelem-adatbázist felépítő, majd szimulációs lépésekben megoldó részt, míg a MSC.Mentat tagja [84] tartalmazza azt a grafikus felhasználói interfészt (GUI), amely az elő- és utófeldolgozást teszi lehetővé, kezelve a bonyolult

geometria és vezérlés megadását. Az optimális futásidő eléréséhez a programokat Fortran nyelven írták. A 3.1 fejezetben felvázolt alapelveken túl még számos olyan fejlesztést is tartalmaz, amellyel optimálisabbá tehetőek az időigényes számítások. Ezek közül érdemes megemlíteni néhányat, amelyeket kihasználtunk munkánkban.

A háromdimenziós végeelem-szimulációkhoz az MSC.Marc által nyújtott elemtípusokat használtuk (3.1. ábra), amelyek kivétel nélkül mind elmozdulásformalizmusban vannak implementálva, azaz csak elmozdulási szabadsági fokokkal rendelkeznek az elemek. A háromdimenziós, tetszőleges, torzult téglalelem (7-es számú elem) egy nyolc csomópontú, izoparaméteres hexaéder, amely trilineáris interpolációt alkalmaz, tehát a deformáció az elemen belül konstans. Ezért szükség lehet a nyírási vagy hajlítási tulajdonságok javítására, amelyet az úgynevezett feltételezett deformáció* interpolációs formalizmus segítségével ér el, amely az izotrop tulajdonságok javulását, de a számítási idő növekedését is okozza. Az elem merevségi mátrixának felépítéséhez nyolc Gauss-féle integrációs pontot használ, azonban a közel összenomhatatlanságot mutató viselkedést (képlékeny alakváltozás, kúszás) érdemes egy módosított, szelektív integrálási eljárással kezelni, amelyben a deviatorikus deformációkomponensek számításához nyolc Gauss-pontot, míg a dilatációs járulékokhoz csak az elem középpontját használja, és így a térfogatszámítás sem okoz nagy hibát. Ezt a módszert állandó dilatációnak† nevezik.

A 7-es számú elemnek az eggyel magasabb rendű megfelelője a háromdimenziós, hűsz csomópontú téglalelem (21-es számú elem), amely trikvadratikus interpolációt alkalmaz, és így az elemen belül a deformáció lineárisan változhat. Az elem merevségi mátrixának felépítéséhez 27 Gauss-féle integrációs pontot használ, az előbb említett javításokra itt nincs szükség.

A bonyolult térbeli alakzatok behálózására tetraéder alakú elemeket szokás használni, mert ez viszonylag jól automatizálható. Munkánkban az elsőrendű négy csomópontú tetraédert (134-es elem) használtuk, amelyben szintén konstans deformáció van az elem belsejében. Az elem merevségi mátrixának felépítéséhez az elem középpontját használja integrációs pontként. Ebből az elemből viszonylag finom hálót kell használni, hogy elég pontos eredményt kapjunk, viszont ezzel az elemmel való számítások gyorsak, és kis tárterületet igényelnek.

Az elemek alkalmasak továbbá a termikus tulajdonságok kezelésére is ekkor újabb szabadsági fokként jelentkezik a hőmérséklet. Az MSC.Marc program lehetővé teszi, hogy csatolt termikus és mechanikai szimulációkat is végezzünk.

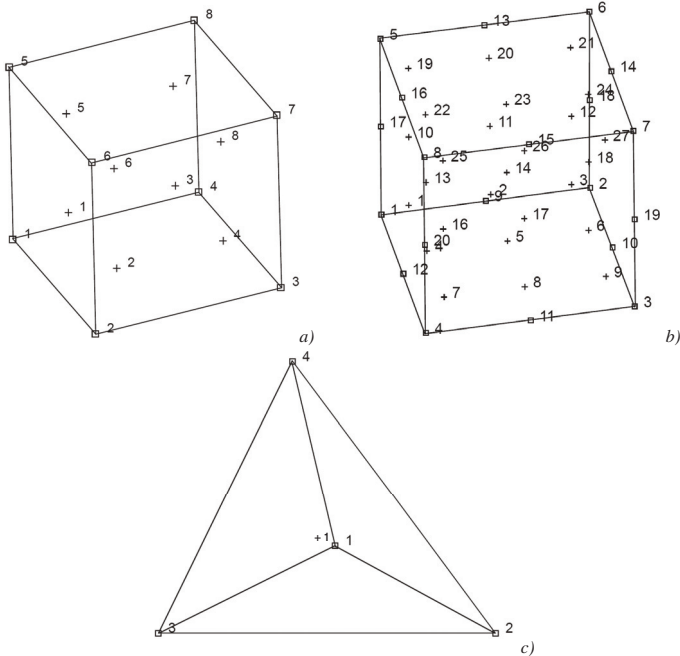
Az MSC.Marc hatalmas előnye sok más programhoz képest, hogy a program lehetővé teszi, hogy felhasználói szubrutinokat használjunk, amelyeket Fortran nyelven kell megírni, és a futtatás kezdetekor befordítani a főprogramba. Így ezek a szubrutinok a szimuláció szerves részét

* angolul assumed strain

† angolul constant dilation

képezik, és a szimuláció közben a program belső adatmezőin keletkező adatokhoz szabad hozzáférést biztosít.

Az MSC.Mentat program előnye, hogy saját utasításkezelő nyelvvel rendelkezik, amelyen keresztül interaktivitás nélkül, külső parancsállományból vezérelve is felépíthető egy komplex végelelemmodell, majd az MSC.Marc számára előállítható a bemeneti állomány. Ugyanis a bonyolult geometriájú alakzatok „kézzel” való létrehozása minden egyes alkalommal igen fáradtságos munka.



3.1. ábra — Az MSC.Marc programban megvalósított elemtípusok sematikus ábrázolása a Gauss-kvadratura pontokkal. a) nyolc csomópontú (7-es számú), b) húsz csomópontú (21-es számú) téglalatest alakú és c) négy csomópontú, tetraéder alakú (134-es számú) végelelem [21]

4 Háromdimenziós szerkezetmeghatározás

Kompozitok háromdimenziós szerkezetmeghatározása alapvetően két módon lehetséges: vagy az anyag párhuzamos rétegenkénti lecsiszolása során képek készítése a metszetekről, vagy az anyag roncsolásmentes, átvilágítással történő vizsgálata. Ez utóbbi módszer további előnye, hogy sokkal pontosabb adatokat kaphatunk a kompozit szerkezetéről, mint a mechanikai csiszolással elérhető eredmények. A fémes anyagok átvilágítását célszerűen röntgensugárzással lehet megvalósítani, az erre épülő módszert röntgentomográfiának, nagyfelbontású változatát röntgen-mikrotomográfiának nevezik, amelyet a '90-es évek végétől lehetett eredményesen alkalmazni, mind a sugárforrások és mérés technika, mind a számítástechnika fejlődésének köszönhetően. Léteznek más sugárforrásokkal (például gammasugárzással, ultrahanggal vagy NMR-tomográfia esetén rádióhullámokkal) megvalósított módszerek is. A tomográfiai méréseket a franciaországi Grenoble-ban található European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) ID19 számú mérőállomásánál végeztük.

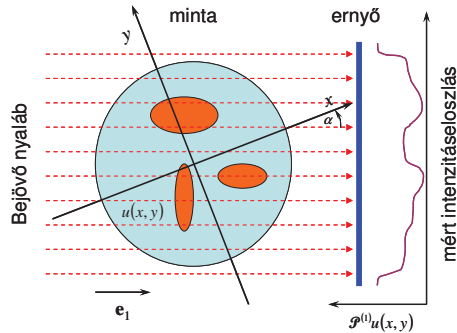
4.1 A tomográfia elve

Az anyagok átvilágítása során a különböző alkotók eltérő hullámtani tulajdonságai alapján lehetséges a szerkezet feltárása, így információt a minta hátsó oldalán gyűjtött intenzitás adatokból nyerhetünk. Ezen adatok feldolgozásához matematikai kiindulópont az úgynevezett vetítési tétel, amely kétdimenziós esetre vonatkozóan kimondja, hogy egy ismeretlen kétdimenziós $u(x, y)$ skalárfüggvényt \mathbf{e}_1 tetszőleges irányban egy egyenesre vetítünk, és a kapott $\mathcal{P}^{(1)}u(x, y)$ függvényt Fourier-transzformáljuk, akkor pontosan ugyanazt a $\mathcal{F}^{(1)}\mathcal{P}^{(2)}u(x, y)$ függvényt kapjuk, mintha az $u(x, y)$ függvény $\mathcal{F}^{(2)}u(x, y)$ Fourier-transzformáltjának az \mathbf{e}_1 irányú $\mathcal{S}^{(1)}\mathcal{F}^{(2)}u(x, y)$ szeletét vennénk. Operátorokkal jelölve:

$$(185) \quad \mathcal{F}^{(1)}\mathcal{P}^{(2)} = \mathcal{S}^{(1)}\mathcal{F}^{(2)},$$

ahol a felső indexek a dimenziószámra utalnak.

A tétel alkalmazásához a gyakorlati megvalósítás vázlatán (4.1. ábra) feltüntetettük a minta vetített képét, azaz a mért intenzitáseloszlást. Nyilvánvaló, hogy minél finomabban forgatjuk a mintát az ábra síkjára merőleges tengely körül, és így minél több α szögértéknél gyűjtjük az intenzitás adatokat a detektoron, annál pontosabban tudjuk előállítani az egyes Fourier-szeleteket, az intenzitáseloszlás Fourier-transzformálásával, és így annál pontosabb szerkezeti rekonstrukciót lehet megvalósítani ideális esetben. A szerkezeti rekonstrukció itt azt jelenti, hogy a szeletekből felépítve a kétdimenziós Fourier-transzformáltat visszatranszformálással megkapható az eredeti szerkezetfüggvény.



4.1. ábra — A vetítés gyakorlati megvalósításának vázlata

A fenti módszer könnyen alkalmazható háromdimenziós esetre, amennyiben kétdimenziós detektorral mérjük az intenzitáseloszlást, miközben a mintát egy vastag párhuzamos nyalábbal világítjuk meg. Természetesen a gyakorlati mérés technika miatt még számos kiegészítő műveletet, szűréseket, korrekciókat kell végezni. A pontos rekonstrukciós algoritmusokról bővebben [85]-ben találhatóak általános információk.

A módszer működéséhez az alapvető fizikai hátteret a Lambert–Beer-törvény adja, amely kimondja, hogy a közeg és a benne haladó sugárzás közötti kölcsönhatás következtében a sugárzás intenzitása elnyelődik, mégpedig a közegben megtett út exponenciális függvénye szerint. Tehát a μ lineáris abszorpció együtthatójú közegbe belépő I_0 intenzitású sugárzás intenzitása x út megtétele után

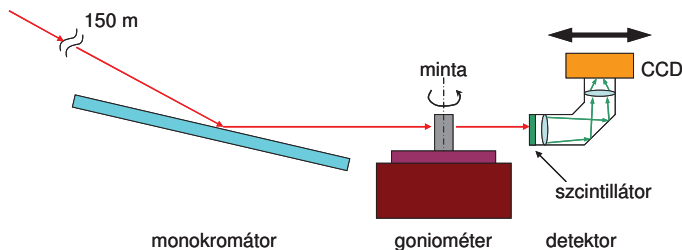
$$(186) \quad I_1 = I_0 e^{-\mu x}.$$

Tehát a vetítéskor a különböző abszorpció együtthatójú szerkezeti részek adnak járulékot a mért intenzitáseloszlásokhoz kiterjedésüktől függően, azaz a rekonstrukcióban a μ változása szerinti térképet fogunk kapni. Minél nagyobb a különböző fázisok közötti abszorpciókülönbség, annál élesebben elkülönülnek egymástól, ellenben — tekintettel a mérés során elkerülhetetlen zaj hatására — kis különbségek esetén ezek a határok elmosódottak lesznek. Az általunk vizsgált Al és Al_2O_3 fázisokat tartalmazó kompozitban az abszorpció különbsége nagyon kicsiny, és így az abszorpció tomográfiával készült rekonstruált képeken a fázisokhoz tartozó szűrkeségi szintek közel megegyeznek. Ezért a tomográfiai módszerek finomított változatait, a fáziskontraszt-tomográfiát és a holotomográfiát kell használnunk a szerkezet feltárására.

4.2 A fáziskontraszt-tomográfia elve

A fáziskontraszt-tomográfiánál használt nyalábnak koherensnek és párhuzamosnak kell lennie, így sugárforrásként wiggler (vagy undulátort) alkalmaznak, amely olyan permanens mágnesekből álló berendezés, amely periodikus mágneses terével a szinkrotronban keringő, keresztülhaladó relativisztikus elektronokat hullámmozgásra kényszeríti, ezzel a kibocsátott

sugárzás intenzitását jelentősen megnöveli. A kilépő röntgennyaláb mérete körülbelül $125 \mu\text{m} \times 25 \mu\text{m}$, ezt a fehér sugárzást diafragmán keresztülvezetve vákuumcsőben juttatják el a mérőkamráig. A mérési elrendezés sematikus rajzán (4.2. ábra) látható módon a bejövő nyaláb a sugárforrástól 150 méterre lévő Si egykristályból készült monokromátorra érkezik. Innen a goniométeren precízen forgatható mintán keresztülhaladva ér el a szcintillátorig, amelyen keletkező látható fotonokat képezi le az optikai rendszer a CCD* eszközre. A leképező rendszer geometriai és optikai tulajdonságaiból kapható a látszólagos pixelméret, amely egyben a mérés felbontását is adja. A forrás kis mérete és nagy távolsága következtében a nyaláb részlegesen koherens, amelyet a transzverzális koherenciahossz jellemez, amely körülbelül $200 \mu\text{m}$ a függőleges irányban. A CCD-ből kiolvasott adatok számítógépes feldolgozásra kerülnek.



4.2. ábra — A tomográfiai mérés sematikus vázlatja. A szinkrotrongyűrűnél lévő 150 m-re van a monokromátortól, így egy igen párhuzamos, kisméretű sugárforrás nyerhető.

Az adatok kiértékelését elősegíti, hogy a nyaláb szinte tökéletesen párhuzamos, így — ellentétben a laboratóriumi röntgenkészülékek kúpos sugármenetével — elegendő a mintát csak 180 fokban körbeforgatni, ami a méréshez szükséges időt is lecsökkenti. A mérendő vetületek N számát úgy becsülhetjük a detektor lineáris pixelszámából (N_p), hogy legfeljebb

$$(187) \quad N = \frac{\pi}{2} N_p$$

számú vetületet érdemes megmérni, mivel ennél több adat már nem fog lényegében javítani a rekonstruált képen, míg ennél jóval kevesebb is már jól kiértékelhető eredményhez vezet. Ez az érték úgy adódik, hogy az $N_p/2$ pixel sugarú minta kerületi pontjairól akkor készül léptetésenként legfeljebb egy pixellel eltolt vetület, ha $1/(N_p/2)$ szöglépésenként haladunk a forgatással a teljes π szögű elforgatáshoz. Empirikus szabályként elfogadott, hogy N értékét $\frac{\pi}{4} N_p$ és $\frac{\pi}{2} N_p$ közöttinek választjuk. Vizsgálataink során 1024×1024 pixel felbontású CCD kamerát használtunk, és ennek megfelelően 900 vetületet használtunk a rekonstrukcióhoz. Érdemes megemlíteni, hogy az alkalmazott FReLoN (Fast Readout Low Noise) detektorok esetén a detektor intenzitásfelbontása 14 bit. Egy kép kiolvasásakor körülbelül 2 MB adat keletkezik, és egy teljes méréskor a kalibrációs adatokkal együtt körülbelül 1000 kép kiolvasása szükséges, ami

* Charge-Coupled Device

2 GB mennyiségű adatot jelent. Ennek az adatmennyiségnek a megmérése fél órát, míg rekonstrukciója egy nagyteljesítményű számítógépen egy órát vesz igénybe. A szinkrotronsugárzás nagy intenzitása teszi lehetővé ezt a viszonylag gyors mérést.

A jó minőségű szinkrotronnyaláb nem csak az intenzitása révén optimális a tomográfiai vizsgálatokra, hanem sokkal több információt is kinyerhetünk a mintából, mint egy hagyományos laboratóriumi tomográfal. Ennek magyarázatához részletesebben meg kell vizsgálnunk a sugárzás és az anyag kölcsönhatását, amelyet a

$$(188) \quad n = 1 - \delta + i\beta$$

komplex törésmutatóval írhatunk le. A valós rész az anyagban terjedő hullám fázissebességével, míg a képzetes rész a sugárzás elnyelődésével kapcsolatos. Ez utóbbi a μ lineáris abszorpciós együttható segítségével és a Lambert–Beer-törvény felhasználásával

$$(189) \quad \beta = \frac{\lambda}{4\pi} \mu$$

alakban írható, ahol λ a sugárzás vákuumbeli hullámhossza, amely a szinkrotron esetén elérhető energiatarományban (8–100 keV) 0,0124–0,155 nm tartományba esik, és β értékét a fotoelektromos hatás, a Rayleigh- és a Compton-szórás határozza meg. A törésmutató valós része a Thomson-szórásból határozható meg:

$$(190) \quad \delta = \frac{r_e \lambda^2 F}{2\pi V_c},$$

ahol r_e a klasszikus elektronsugár, F a szerkezeti tényező és V_c az elemi cella térfogata [86]. Megjegyezzük, hogy röntgensugárzás esetén δ értéke nagyon kicsi, 10^{-5} nagyságrendbe esik, így a nyaláb lényegében nem változtat irányt, miközben a mintán és annak alkotórészein áthalad. Ez teszi lehetővé, hogy a próbatestebe behatoló $A_0(x, y)$ és a mintát elhagyó $A(x, y)$ síkhullámokat a nyalábra merőleges x – y síkú vetületben kezeljük, és kapcsolatokat az

$$(191) \quad A(x, y) = M(x, y) e^{i\varphi(x, y)} A_0(x, y)$$

összefüggéssel vegyük figyelembe, ahol az áteresztést (transzmissziót) a

$$(192) \quad M(x, y) = e^{-\frac{1}{2} \int \mu(x, y, z) dz}$$

vetített abszorpciós tényező határozza meg, míg a fázistolást a törésmutató valós részének vetített értékével határozhatjuk meg:

$$(193) \quad \varphi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz.$$

A mintától d távolságra elhelyezett detektoron mért intenzitás M és φ függvényében [87], [88]

$$(194) \quad I_D(x, y) = I_0 M^2(x, y) \left(1 - \frac{\lambda D}{2\pi} \nabla^2 \varphi(x, y) \right),$$

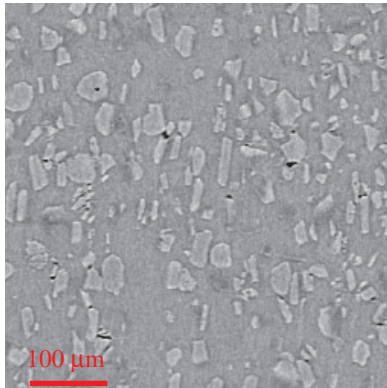
ahol I_0 a mintára érkező sugárzás intenzitása és

$$(195) \quad D = \frac{ld}{l+d}$$

a defokuszálási távolság, ahol l a sugárforrás és a minta távolsága. Mivel a szinkrotronos mérési elrendezésben l körülbelül 150 m és d körülbelül 10 cm, a defokuszálási távolság lényegében d értékével egyezik meg. Feltételezve, hogy (194) zárójelében szereplő második tag jóval kisebb, mint 1, közelíthető a

$$(196) \quad \ln\left(\frac{I_0}{I_D(x,y)}\right) = -2\ln M(x,y) + \frac{\lambda D}{2\pi} \nabla^2 \varphi(x,y)$$

kifejezéssel. Tehát a rekonstrukció után a fázis második deriváltja és az abszorpció által meghatározott térbeli mintázatot fogjuk kapni. A (196) összefüggés alapján nyilvánvaló, hogy $d=0$ esetén csak az abszorpció mintázatát fogjuk kapni, míg $d>0$ esetén a fázistag is ad járulékot, ami ott lesz jelentős, ahol a $\nabla^2 \varphi(x,y)$ nullától különbözik. Homogén anyagban ez a mennyiség nulla, viszont a belső határfelületeken jelentősen megváltozhat, ahol egy interferenciacsík fog megjelenni. Ezt szemlélteti a 4.3. ábra, ahol a fémmátrixba ágyazott kerámiarészecskék körül sötét-világos csíkok láthatóak. A két fázis belsejében a szürkességi szint közel megegyezik, hiszen az Al és Al_2O_3 abszorpciók együtthatója lényegében megegyezik, tehát csak a fázis által kialakított kontrasztok segítenek a szerkezetmeghatározásban. A határok annál kontrasztosabbak, minél nagyobb a δ/β arány, amely a karakterisztikus élek tartományától eltekintve a sugárzás energiájával nő [88]. Az általunk kiválasztott 20,5 keV-os energián a mátrix és a részecske közötti különbség a fázisra vonatkozóan $\Delta\delta = 0,29 \cdot 10^{-6}$, míg az elnyelődésre vonatkozóan $\Delta\beta = 0,43 \cdot 10^{-9}$, tehát mintegy 1000-szeres a különbség a fáziskontrasztra nézve. Azonban fáziskontraszt-tomográfias rekonstrukcióval még mindig nem sikerült a részecsketömrölések esetén a részecskéket elválasztani élkereső algoritmusokkal.



4.3. ábra — Al/ Al_2O_3 kompozit fáziskontraszt-tomográfival kapott rekonstruált mikroszerkezetének kétdimenziós metszete

4.3 A holotomográfia elve

Láttuk, hogy a fázis által létrehozott kontrasztot lehet jól kihasználni a szerkezeti rekonstrukció jobb minőségének elérése érdekében. Tehát a fáziskontraszt-tomográfiai módszert abban az irányban kell továbbfejleszteni, hogy egyedül a fázisinformációból határozzuk meg a szerkezetet, ne az abszorpció és a fázis együtteséből, mivel az abszorpció nem hordozott számunkra különösebb információt, viszont így a fázis csak kis mértékben tudta megnövelni a végső kép kontrasztját.

Ha csak a fázist használjuk fel képpalkotásra, akkor a mátrixon és a részecskéken belül homogén, de különböző szűrkeségi szinteket fogunk kapni, annak megfelelően, hogy homogén közegben a fázis állandó, és csak a határfelületeken ugrik. Ebben a holotomografikus rekonstrukcióban viszont szükség van a mintából kilépő hullám fázisára [89]. Ez a fázisprobléma közvetett módon megoldható, ha több különböző távolságban megmérjük a vetített intenzitáseloszlást. Megjegyezzük, hogy az itt vázolthoz hasonló módszert alkalmaznak a nagyfelbontású transzmissziós elektronmikroszkópiában (HRTEM) az elektronnyaláb defokuszálásával [90].

Tekintsük tisztán fázistárgynak a mintát, azaz az abszorpció hatását hanyagoljuk el! Ekkor (196) alapján kis térfrekvenciák esetén a fázis meghatározható a Laplace–Poisson-egyenlet megoldásával [91]. Azonban a megoldást erősen befolyásolja a zaj, tehát ezt kiküszöbölendő legalább két minta–detektor távolságban kell megmérni az intenzitáseloszlást a Talbot-effektust figyelembe véve, amely szerint egy a periódusú fázistárgy mögötti intenzitáseloszlás a tárgytól távolodva

$$(197) \quad L_T = \frac{2a^2}{\lambda}$$

periódussal ismétlődik, ahol L_T az úgynevezett Talbot-hossz, és $L_T/2$ távolságnál fázisfordított mintázat alakul ki [92]. Ha az N különböző minta–detektor távolságot D_m jelöli, ahol $m = 1, \dots, N$, akkor a mért intenzitáseloszlás Fourier-transzformáltját közelíthetjük az

$$(198) \quad \tilde{I}_m(f) = Q_m(f) + 2\tilde{R}_m(f) \sin(\pi\lambda D_m f^2) \tilde{\varphi}(f) + \tilde{I}_{NL}(f)$$

kifejezéssel, ahol \tilde{R}_m , $\tilde{\varphi}_m$ és \tilde{I}_{NL} rendre a detektor átviteli függvényének, a fázisnak és a további nemlineáris tagoknak a Fourier-transzformáltja, és Q_m jelöli az átlagos intenzitást [93]. Továbbra is kis térfrekvenciákkal közelítve a nemlineáris tagokat elhanyagolhatjuk, és az így kapott lineáris egyenletrendszer megoldjuk a legkisebb négyzetek módszerével. Ekkor legalább $N = 2$ távolságban kell megmérnünk az intenzitást. Az általános megoldás

$$(199) \quad \tilde{\varphi}(f) = \frac{1}{N} \frac{\sum_{m=1}^N \psi_m(f) \tilde{I}_m^{\text{exp}}(f)}{\Psi(f)},$$

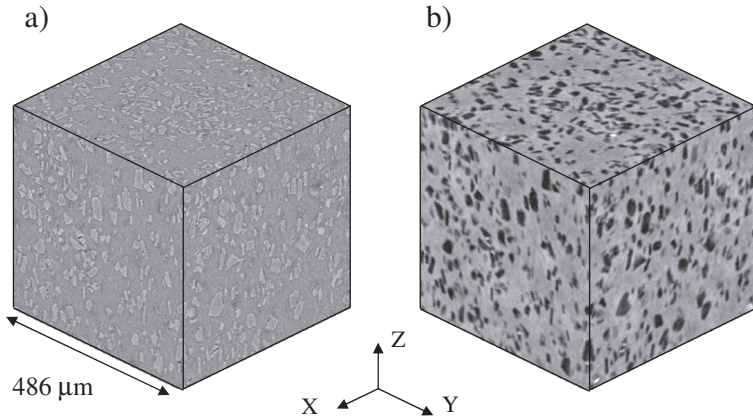
ahol

$$(200) \quad \psi_m(f) = \tilde{R}_m(f) \sin(\pi \lambda D_m f^2)$$

és

$$(201) \quad \Psi(f) = \frac{2 \sum_{m=1}^N \tilde{R}_m^2(f) \sin^2(\pi \lambda D_m f^2)}{N}.$$

Ezek alapján 12 és 100 mm távolságra meghatározva a fázist, majd ezzel végrehajtva a rekonstrukciót megkaptuk a holotomografikus képet, amelyen az azonos szűrkeségi szintek azonos anyagösszetételt jelentenek. Szemléltetésként a fáziskontraszt-tomográfia (4.4a ábra) és a holotomográfia (4.4b ábra) módszerével készült rekonstrukciókat egymás mellett is megmutatjuk. Mint látható, a holotomografikus rekonstrukció esetén alkalmasan választott szűrkeségi szint szerinti különválasztással a mátrix és a részecskék megkülönböztethetőek. Az így kapott részecskeméreteket pontosabbak lesznek, mint a fáziskontraszt-tomográfias rekonstrukcióból származtatható méretek, mivel az interferenciacsíkok szélessége befolyásolja a határfelület meghatározását. Megjegyezzük, hogy az interferenciacsíkok a minta-detektor távolság növelésével szélesednek, és akár több rend is megjelenhet.



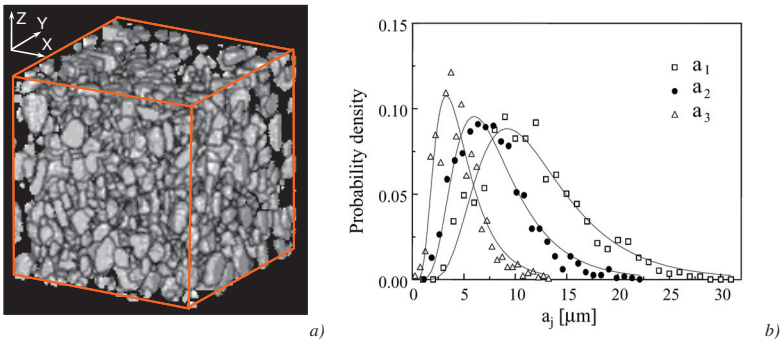
4.4. ábra — a) A fáziskontraszt-tomográfias és b) a holotomografikus rekonstrukció eredményének összehasonlítása ugyanazon a térfogaton

A holotomográfianak további előnye, hogy a megjelenő szűrkeségi szintek a sűrűséggel kapcsolatosak, így az esetleg ismeretlen fázisok is beazonosíthatóak. Például a fáziskontrasztos képen néhány részecske környezetében sötét foltok is megjelentek, amelyek a holotomografikus képen világos színűek, ezek az apró üregek következményei, amelyek a nem tökéletes gyártástechnológia, illetve a deformált anyagban a részecsketörések és a mátrix-részecske határfelületek szétszakadásával magyarázható. A mátrix világosabb, míg a részecskék sötétebb szűrkekben jelennek meg a sűrűségüknek megfelelően.

5 Szerkezetkiértékelés a holotomografikus rekonstrukció alapján

5.1 Elsődleges szerkezetanalízis

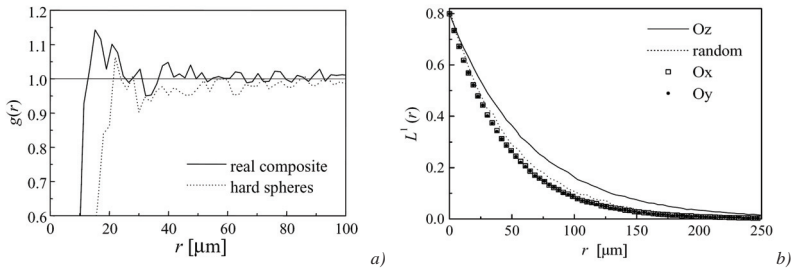
A holotomografikus rekonstrukció eredményét képelemzési eljárásoknak vetettük alá a tomo3D elnevezésű, az ELTE Anyagfizikai Tanszéken fejlesztett szoftver segítségével [94]. A jól elkülönülő részecskék esetén szűrkeségi szint szerinti binarizálással könnyen szétválaszthatóak a fázisok, viszont egymáshoz közeli részecskékből álló csoportosulásoknál már a részecskék középpontokból indított növekedési algoritmusokkal kellett szétválasztani az egyes részecskéket. A rekonstrukció térbeli felbontása a kétdimenziós detektor látszólagos pixelméretéből adódik, amely lineáris mérete $1,9\ \mu\text{m}$, ebből következően a voxelek (háromdimenziós pixelek) élhossza is $1,9\ \mu\text{m}$. A teljes mért térfogatból kivágott kocka alakú ürengmentes tartomány élhossza $243\ \mu\text{m}$, azaz $128 \times 128 \times 128$ voxelből állt a vizsgált, immáron binarizált térfogat, amelyen végzett szerkezetanalízis eredményeit ismertetjük most röviden [23].



5.1. ábra — a) A kompozitból kivágott $243\ \mu\text{m}$ élhosszúságú térfogat binarizált háromdimenziós mikroszerkezete. A mátrix átlátszó, csak a kerámiarészecskék láthatók. A Z irány megegyezik a sajtolás irányával. b) A részecskékre illesztett ekvivalens ellipszoidok nagy (a_1), középső (a_2) és kis (a_3) féltengelyei nagyságának eloszlása. A folytonos vonal az illesztett lognormális eloszlást jelöli. [23]

A számítógép segítségével térben ábrázolt szerkezet látható az 5.1a ábrán, ahol a mátrix átlátszó, csak a kerámiarészecskék láthatók. Szembeötlő, hogy a részecskék alakja kissé lapos, és a nagyobbik lapjukkal többé-kevésbé a Z irányra merőlegesen néznek. Ezeket a megállapításokat mennyiségileg is jellemezendő, a részecskék ekvivalens ellipszoidokkal voltak közelítve az ellipszoidra és a részecskére vonatkoztatott tehetetlenségnyomaték-tenzorok egyenlőségének feltételezésével (2.2.1 alfejezet). Ebből a féltengelyek irányát és nagyságát lehet meghatározni. A kiértékelés alapján az látszott, hogy a részecskék alakja többnyire általános ellipszoidokkal írható le, a forgásellipszoidok számaránya 10% alatti. Az ekvivalens ellipszoidok féltengelyeinek méreteloszlása lognormális eloszlással közelíthető (5.1b ábra), és minden tengelypár között a

korrelációs együttható 0,7 fölötti, amelyet konvencionálisan erős korrelációnak nevezünk (2.2.2 alfejezet). Ez azt jelenti, hogy ha a részecske valamely féltengelye az átlagosnál nagyobb, akkor nagy valószínűséggel a másik két féltengelye is nagyobb. A lognormális eloszlás illesztéséből leolvasható féltengelyek aránya 9,2 : 6,0 : 3,3, ahol az értékek egyben a féltengelyek mikrométerben megadott átlagos hosszát is jelentik. A részecskék irányítottasága a féltengelyeknek a rúdsajtolás irányával (a Z irány) bezárt szögének eloszlásával jellemezhető. Így az adódott, hogy az ellipszoidok túlnyomó részének legkisebb tengelye a sajtolási irányra közel merőleges, ezzel alátámasztva azt a vizuálisan megfigyelhető tényt is, hogy a részecskék a sajtolás irányába „befordultak”, azaz a legnagyobb keresztmetszetükkel a Z iránnyal párhuzamosan helyezkednek el. Az egyes részecskék alakját jellemzi továbbá, hogy a féltengelyek karcsúsága is lognormális eloszlást követ, és a nagytengely, illetve középső tengely kistengelyhez viszonyított karcsúsága rendre átlagosan 2,1, illetve 1,5, és az eloszlás szélessége majdnem egyenlő: 0,32 és 0,30. Ezen karcsúságok és a részecskék mérete között nincs korreláció.



5.2. ábra — a) A részecskéközéppontok páreloszlásfüggvényei a valódi kompozitban és a véletlen merevgömb-modellben [23]. b) Az egyenesúthossz függvény a valódi kompozitban három különböző irányban: sajtolási irány (O_z), és a két erre merőleges irányban (O_x , O_y). A pontozott vonal a véletlen merevgömb-modellre vonatkozik összehasonlítás céljából [23].

A részecskék önálló tulajdonságain kívül érdemes jellemezni az egymáshoz képest való elhelyezkedésüket is. A 2.2.3 fejezetben bemutatott $g(r)$ párkorrelációs függvény a rekonstruált szerkezet esetén csak numerikusan számítható, amelyet olyan véletlen elrendeződésű merevgömb-moddellel célszerű összehasonlítani, amelyben a gömbök mérete a kerámiarészecskék méreteloszlását követi. Tehát minden részecskét helyettesítve egy vele egyező térfogatú gömbbel, majd az ebből felépített merevgömb-rendszerre is meghatározva a $g(r)$ függvényt, látható (5.2a ábra), hogy a valódi kompozit esetén jelentősen 1 fölül is nő a kis r távolságok tartományában, míg a gömbmodell esetén 1 alatt marad. Levonható az a következtetés, hogy valószínűleg a kerámiarészecskék lapult alakjuk miatt közelebb tudnak egymáshoz kerülni, mint a gömbök, és így részecskecsoportosulások jöhetnek létre. Másrészt, ha csak a legközelebbi szomszédok távolságának eloszlását vizsgáljuk, akkor az átlagos távolság a részecskéközéppontok között a valódi kompozit esetén $13,8 \mu\text{m}$, míg a véletlen merevgömb-moddellel $16,5 \mu\text{m}$ adódik, tehát alátámasztja azt az állítást, hogy a valódi szerkezetben átlagosan közelebbi elrendeződést

mutatnak a részecskék, mint a gömbmodellben. Megjegyezzük, hogy a görbe erős lépcsőzetessége abból adódik, hogy viszonylag kevés részecskére van a görbe numerikusan kiszámítva, ezért a görbéről csak nagy bizonytalansággal olvasható le a részecskék közötti távolságokat jellemző 25–30 μm -es korrelációs hossz. Ez az eredmény jó összhangban van a kétdimenziós metszeteken történt vizsgálatokkal, ahol valamivel nagyobb korrelációs hossz adódott a sajtolás irányával párhuzamos, mint az arra merőleges metszeteken [13].

Ezt az irányfüggést pontosabban kiemelezendő, érdemes az egyenesúthossz-függvényt kiértékelni a szerkezet jellemzésére (2.2.3 fejezet). A mátrixra vonatkozó $L^1(r)$ függvényt numerikusan kiszámítva a sajtolás irányában és az arra merőleges két irányban (5.2b ábra), az alakja egy lecsengő exponenciális függvénnyel illeszthető, és az adódik, hogy a sajtolás irányában nagyobb a karakterisztikus hossz (63 μm), mint a másik két irányban, ahol ezek a hosszak egyenlőnek adódtak (43 μm). Az előzőekhez hasonlóan a merevgömb-modellre is meghatározva ezt a függvényt, természetesen a három irányban ugyanazt adja, és a valódi kompozitra vonatkozó függvények között halad. Azaz levonható az a következtetés, hogy a sajtolás irányára merőleges síkokban az egyenes úthosszak szempontjából statisztikusan izotróp a szerkezet.

5.2 Kibővített szerkezetanalízis [S1]–[S5]

Ebben az alfejezetben olyan szerkezeti eredményeket részletezünk, amelyek saját vizsgálatokon alapszanak, némely esetben kibővítve és részletesebben tárgyalva az irodalomban esetleg már szereplő megfigyeléseket.

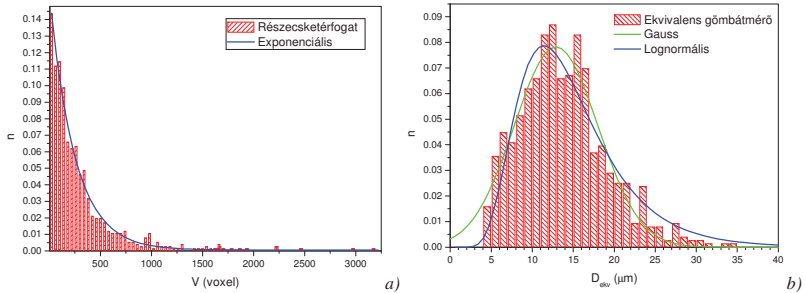
Az alakkal kapcsolatos vizsgálatokat a 243 μm élhosszúságú kivágott térfogaton (128^3 voxel) végeztük, mivel itt a részecskék egyenként le lettek ellenőrizve, hogy a képfeldolgozási műveletek után nem tartalmaz összeérő részecskéket, egyéb a mérés/rekonstrukció során keletkezett feldolgozási hibákat. Míg az olyan feladatoknál, ahol nem számít a részecskék konkrét alakja, viszont a jobb statisztika kedvéért szükséges a nagy térfogat, ott az eredeti henger alakú rekonstruált térfogat közepéből kivágott 972 μm élhosszúságú, kocka alakú térfogatot (512^3 voxel) használtuk.

5.2.1 Részecskeméret, részecskekarcsúság

A részecskék méretének átlagokkal való jellemzése nem is olyan egyszerű, mint első ránézésre gondolnánk. Rövid áttekintést adunk, hogy a különböző megközelítések milyen eredményt adnak. A részecskék alakja szabálytalan, ezért méretüket az adott szerkezeti rekonstrukció esetén legpontosabban a térfogatukkal lehet jellemezni. A 128^3 voxel méretű rekonstruált térfogatban 1277 darab részecske található, amelyek közül a legkisebb 6 voxel, a legnagyobb 3526 voxel foglal magában. A részecskék térfogat szerinti eloszlását mutatja az 5.3a ábra, amelyen jól látható, hogy ez az eloszlás jól közelíthető egy exponenciális eloszlással, azaz igen sok kis térfogatú, míg csak egy-egy darab kirívóan nagy térfogatú részecskét tartalmaz a

rekonstruált térfogat. Egy részecske átlagos térfogata 296 voxel, amely érték szórása viszonylag nagy, kb. 120%-os, ebből az ekvivalens gömbátmérő kb. 15,7 μm -nek (8,2 voxel) adódik. Az eloszlás ilyenkor szokásosan vett mediánja viszont kb. 180 voxelnél van, amiből 13,3 μm (7 voxel) ekvivalens gömbátmérőt kapunk.

Ha azonban az egyes részecskék lineáris méreteit szeretnénk jellemezni, akkor az ekvivalens gömbátmérők eloszlásfüggvényét kell tanulmányoznunk. A 5.3b ábra alapján a Gauss-görbe és a lognormális eloszlásgörbe centruma 12,9 μm , illetve 13,6 μm volt, míg az átlagos gömbátmérő kb. 13,8 μm -nek adódik. Így az ábráról könnyen leolvasható megfigyelést számszerűen is igazoltuk, miszerint a lognormális eloszlás jobban jellemzi az ekvivalens gömbátmérő eloszlását. Így megállapíthatjuk, hogy a részecskéket több szempontból megvizsgálva az átlagos méretük közelítőleg 14 μm -nek vehető, amely közel van a részecskék középpontok átlagos távolságához, tehát a gömbökkel való közelítés azt adná, hogy a részecskék gyakran összeérnek.

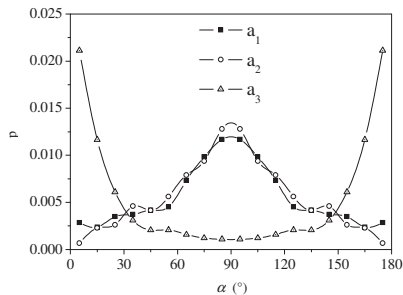


5.3. ábra — A részecskék V térfogatának (a) és D_{ekv} ekvivalens gömbátmérőjének (b) gyakoriság (n) szerinti eloszlása a rekonstruált térfogatban.

A részecskék alakja azonban nem csak a térfogatukból származtatható átlagos méretek, hanem az irányítottóságuk szerint is elemezhető, hasonló módszerrel, mint azt már az 5.1 alfejezetben leírtuk. A részecskékre történő ekvivalens ellipszoidok illesztése alapján a féltengelyek méretéből számított átlagos méretek a három főtenyeg irányában $\langle a_1 \rangle = 9,2 \mu\text{m}$, $\langle a_2 \rangle = 14,8 \mu\text{m}$ és $\langle a_3 \rangle = 22,0 \mu\text{m}$, míg az egyes részecskék féltengelyeinek arányából számított átlagos karcsúság az $\langle a_3 : a_2 : a_1 \rangle = 2,46 : 1,66 : 1$ aránnyal adható meg, ahol a_1 a kis-, a_2 a közepes és a_3 a nagytengely. Továbbá azt kaptuk, hogy az egyes részecskékre kapott $a_3 : a_1$ és az $a_3 : a_2$ arány között 0,72-os együtthatójú erős korreláció van, amelyből arra következtethetünk, hogy ezek az átlagos arányok jól jellemzik az egyes részecskék karcsúságát. A rekonstruált térfogatban a részecskék térfogati hányada 19,24%, míg a nagyobb, 512³ voxeles térfogatban 19,53%.

5.2.2 Részecskeorientáció

A részecskék tengelye nem esik egybe a külső koordináta-rendszer tengelyeivel, viszont, mint azt az 5.1 fejezetben említettük, a részecskék nagytengelye többé-kevésbé a sajtolás Z tengelye irányában áll. Mivel a későbbiekben ez a Z irány lesz a külső terhelés iránya, ezért érdemes részletesen megvizsgálni, hogy ehhez az irányhoz képest hogyan helyezkednek el a részecskék. Az 5.4. ábrán feltüntettük a részecskékre illesztett ekvivalens ellipszoidok tengelyeinek Z iránnyal bezárt szögének eloszlásfüggvényeit, amelyről leolvasható, hogy a legnagyobb tengely valóban nagy valószínűséggel a Z irány közelében helyezkedik el, miközben a két kisebb tengely nagy valószínűséggel az erre merőleges sík közelében fekszik, és gyakorlatilag egyforma eloszlást követnek.



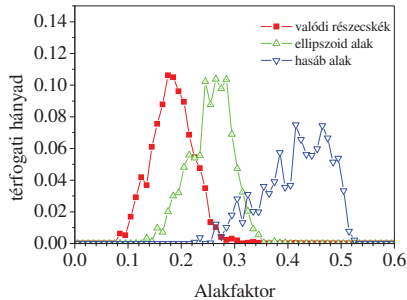
5.4. ábra — A külső terhelés iránya (Z) és a részecskékre illesztett ekvivalens ellipszoid kis- (a_1), középső (a_2) és nagytengelyének (a_3) iránya által bezárt szögének (α) eloszlásfüggvényei

5.2.3 Alakfaktor

A részecskéknél nem csak a kiterjedése, hanem alakja is fontos szerkezeti jellemző. Próbáltunk olyan paramétert találni, amely viszonylag egyszerűen tudja mennyiségileg és átlagosan jellemezni a kompozitban található kerámiarészecskék — csak sok paraméter segítségével leírható — alakját. Ettől az alakjellemezőtől elvártuk, hogy a részecskéknél leginkább a kompaktságát és konvexitását jellemezze. Elvárásaink szerint a legkompaktabb egy paraméterrel leírható test a gömb. Ugyancsak egyparaméteres test a kocka is, viszont kevésbé tekintjük kompaktnak, mert a tömegközéppontjától átlagosan távolabb helyezkednek el a pontjai, mint egy ugyanakkora térfogatú gömbnek, és ezt felszínének viszonylagos növekedése is jelzi. Nyilvánvaló ugyanakkor, hogy egymástól nem túlságosan különböző méretű testek közül a konvexnek kisebb a felszíne, mint a konkávnak. Továbbá az 5.1 fejezetben ismertetett ekvivalens ellipszoidok módszerével azért közelíthetők jól a részecskék, mert láthatóan alakjuk konvex és szélsőséges torzulásoktól mentes. Ezen megfontolások alapján a

$$(202) \quad K \equiv \frac{36\pi V^2}{S^3}$$

alakfaktort fogjuk használni a részecske alakjának jellemzésére [51], ahol V és S a test térfogata és felszíne. Gömb esetén $K = 1$, kocka esetén $K = \pi/6 \approx 0,524$, míg hasáb és ellipszoid alakú testek esetén értéke függ a karcsúságtól. Ha az ekvivalens ellipszoidok statisztikájából kapott karcsúsággal számolunk, akkor ellipszoidokra $K \approx 0,724$, míg hasábokra $K \approx 0,427$ értékeket kapnánk. Azonban a gyakorlatban a voxelek rácsa miatti felbontásbeli hatás az alakfaktorban is megnyilvánul a véges felbontás és a rácson történő felszínszámítás miatt. Ezért az alakfaktorokat a valódi méreteloszlások alapján rácson előállított szerkezeti szimuláció alapján is meghatároztuk ellipszoidok és hasábok esetére is. Ekkor azonban az alakfaktorok már különbözőek lesznek az egyes részecskékre, tehát csak az alakfaktorok eloszlásával tudjuk jellemezni a szerkezeteket (5.5. ábra). Az eloszlásokból leolvasható, hogy az ellipszoidalak ($\bar{K}_{ell} = 0,25$) jóval közelebb áll a valódi szerkezethez ($\bar{K}_{mert} = 0,19$) az alakfaktor szempontjából, mint a hasábalak ($\bar{K}_{hasáb} = 0,42$) mind az átlagos érték, mind az eloszlás alakja szempontjából.



5.5. ábra — A részecskék alakfaktorának eloszlása a valódi kompozitban, az ellipszoid- és a hasámodellben

5.2.4 Lokális térfogatok

5.2.4.1 A lokális térfogatok meghatározása

Ha azt feltételezzük, hogy a kompozit rendszer kis deformációi esetén a mátrixba ágyazott merev részecske elsősorban a közvetlen közelében lévő mátrixszal lép kölcsönhatásba, akkor szerkezeti szempontból érdemes megvizsgálni, hogy az egyes részecskék átlagosan milyen környezetben helyezkednek el. Ennek érdekében minden egyes mátrixhoz tartozó voxelhez meghatároztuk, hogy melyik részecske felületéhez van a legközelebb, majd a részecske úgynevezett „lokális térfogathoz” rendeltük hozzá. Így a teljes rekonstruált térfogat újra felosztható az ilyen lokális térfogatok szerint, ezt mutatja az 5.6a ábra.

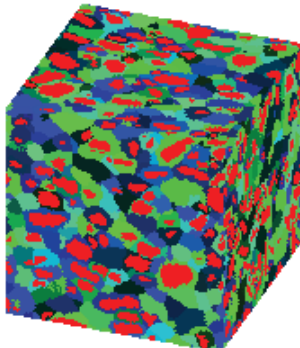
5.2.4.2 A lokális térfogatok térfogati hányadának eloszlása

A lokális térfogatokra felosztott szerkezetre úgy tekinthetünk, mintha mátrixba ágyazott részecskékből mint építőkövekből állna a kompozit. Ezeket az építőköveket célszerű a

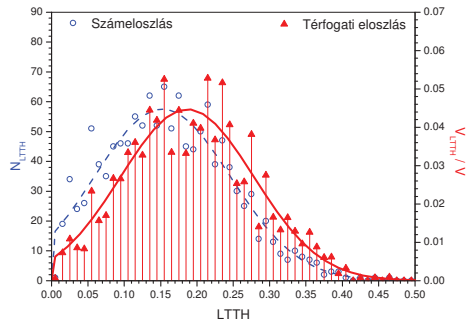
kerámiarészecske térfogati hányadával jellemezni, amelyet a továbbiakban a lokális térfogat térfogati hányadának hívunk és LTTH-val rövidítünk, majd az eloszlását vizsgálni. Tehát ha a részecske térfogata V_p és a mátrix térfogata V_m egy ilyen építőköben, akkor

$$(203) \quad LTTH = \frac{V_p}{V_p + V_m}.$$

Az 5.6b ábrán feltüntetettük az LTTH-k mind számszerinti, mind a térfogathoz való járulékok szerinti eloszlását. Látható, hogy mindkét esetben hasonló félértékszélességű Gauss-görbékkel jól közelíthetők az eloszlások, azonban a számeloszlás balra eltolódott a névleges térfogati hányadhoz képest, míg a térfogati eloszlás ennek megfelelő átlagértéket ad vissza. Ez is azt mutatja, hogy a szerkezetanalízis eredményeit csak kellő körültekintéssel szabad alkalmazni a modellezés során, azaz az előforduló fizikai mennyiségek várható értékének számításakor ügyelni kell arra, hogy térfogati reprezentativitás szerinti átlagokat kell figyelembe venni. Tehát ergodikusságról a lokális térfogatok esetén nem beszélhetünk, hiszen a végtelen sok megvalósulásuk szerinti átlag nem egyezik a végtelen térfogatra vett átlaggal. Megjegyezzük, hogy a statisztikában természetesen csak azok a lokális térfogatok szerepelnek (760 darab), amelyek nem érintkeznek a 128^3 voxeles térfogat vágási határával.



a)



b)

5.6. ábra — a) A rekonstruált szerkezet lokális térfogatokra való felosztása. Piros színnel a kerámiarészecskék, egyéb színekkel a hozzájuk rendelt mátrix látható. b) A lokális térfogatok térfogati hányadának (LTTH) eloszlása számuk és térfogati részesedésük szerint, valamint az ezekre illesztett Gauss-függvény.

5.2.4.3 A lokális térfogatok karcsúsága

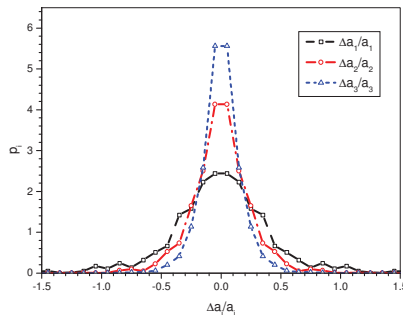
A lokális térfogatokra is megvizsgáltuk, hogy milyen méretekkel jellemezhetőek az ekvivalens ellipszoidokkal történő illesztés alapján. Elsősorban a lokális térfogatok karcsúsága és a részecskék karcsúsága közötti kapcsolatot szeretnénk megvizsgálni. Mivel ezen térfogatok alakja igen szabálytalan, és az illesztés is pontatlanabb, nem vártunk kiemelkedő összefüggésekre. Kiderült azonban, hogy ha $A_1 \leq A_2 \leq A_3$ jelöli az illesztett ellipszoidok tengelyeit, akkor legalább

0,7-es együttthatójú korrelációt tapasztalunk az a_i és A_j tengelyek között, ha azonban $i = j$, akkor kaptuk a legerősebb, 0,8–0,9 közötti korrelációt. A lokális térfogatok átlagos méretei: $\langle A_1 \rangle = 19,8 \mu\text{m}$, $\langle A_2 \rangle = 27,2 \mu\text{m}$ és $\langle A_3 \rangle = 37,6 \mu\text{m}$. Ugyanakkor a részecskére és a lokális térfogatra illesztett ellipszoidtengelyek iránya között már nem volt közvetlen korreláció, egyedül 0,53-os együttthatójú gyenge korrelációt a részecske nagytengelyének és a lokális térfogat nagytengelyének Z-vel bezárt szöge között találtunk. Tehát csak statisztikai értelemben van összefüggés a lokális térfogat mérete és a részecske mérete között. A lokális térfogatok karcúságai is közel lognormális eloszlást mutatnak, a nagytengely, illetve középső tengely kistengelyhez viszonyított karcúsága rendre átlagosan $A_3 : A_1 = 1,93$, illetve $A_2 : A_1 = 1,40$.

5.2.4.4 A részecskék lokális excentricitása

A részletesebb vizsgálatokból kiderül, hogy a részecskék nem a lokális térfogatok közepén helyezkednek el, hanem kissé eltolódnak. A relatív eltolódás szerinti eloszlásfüggvények az 5.7 ábrán láthatók, ahol Δa_i jelöli a részecske középpontjának a lokális térfogatbeli mátrix középpontjához viszonyított abszolút elmozdulását, amelyet az a_i féltengely hosszával normálunk.

Az eloszlásfüggvények nullára való szimmetrikussága nyilvánvalóan következik abból, hogy a részecskék eltolódása a lokális térfogaton belül ugyanolyan valószínű mind pozitív, mind negatív irányban, hiszen egyik sem kitüntetett irány. Tehát az eloszlások várható értéke is nulla. Legvalószínűbben a lokális térfogat közepe és környékén helyezkednek el a részecskék, azonban a lokális térfogatok tömegközéppontjának és a részecskék tömegközéppontjának távolsága a részecske ekvivalens sugarával normált relatív skálán átlagosan 0,36. Ebből az is következik, hogy részecskecsoportosulások vannak jelen az anyagban. Leszögezhetjük azt is, hogy zömében 50% alatti a relatív eltolódás, tehát nem kirívóan nagyok ezek az értékek.



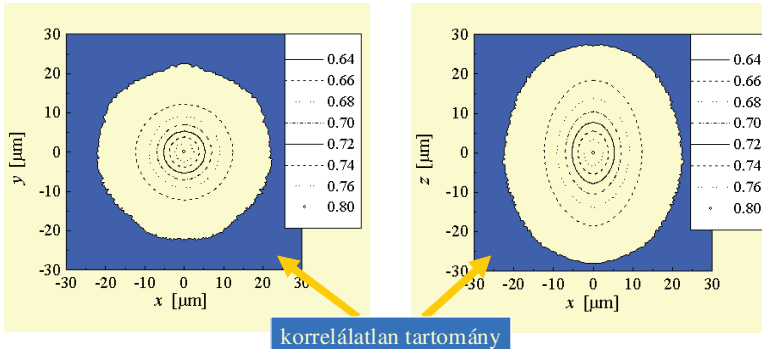
5.7. ábra — A részecskék középpont relatív eltolódásának ($\Delta a/a_i$) valószínűsűrűség-függvényei (p) a három tengely irányában.

5.2.5 Párkorrelációs függvények

A 2.2.4 fejezetben ismertetett elméleti megfontolásokat és definíciókat a rekonstruált szerkezetre is alkalmaztuk. Természetesen nem elvárható egy valóságos szerkezet vizsgálata esetén, hogy végtelen térfogatra vagy végtelen számú szerkezeti megvalósításra vett átlagolásokat alkalmazzunk. Azonban létezhet elegendően nagy térfogat — szokásos neve: geometriailag reprezentatív térfogat —, amelyre vett átlagok már jól közelítik az ennél nagyobb térfogatra vett átlagokat.

A rekonstruált véges térfogaton történő mintavételből meghatározott kétpont-valószínűségi függvényekre, megkülönböztetendő a (66) szerint definiált folytonos megfelelőjüktől, P_{00} , P_{01} , P_{10} és P_{11} jelölésekkel hivatkozunk, aszerint hogy a véletlenszerűen kiválasztott két pont a mátrixban (0) vagy a részecskében (1) helyezkedik el. Az egypont-valószínűségi függvény (68) szerinti konstans elméleti értékét pedig az f_V névleges térfogati hányaddal helyettesítjük. A függvények kiértékelésénél feltételezzük, hogy a rekonstrukció térfogatának skáláján a szerkezet statisztikusan homogénnek tekinthető.

Vizsgáljuk meg először a $P_{00}(\mathbf{r})$ mátrix-mátrix párkorrelációs függvényt (5.8. ábra) a 128^3 voxel méretű térfogaton! Mivel ez háromdimenziós vektor-skálár függvény, célszerű az egyes síkmetszeteit tekinteni. A sajtóirányra merőleges (transzverzális) metszetét tekintve szembevetendő az egyes értéknívók kör alakja, azaz a síkmetszet közel körszimmetrikus volta, míg a Z tengellyel párhuzamos (longitudinális) metszetben ugyanezek az értéknívók tengelyirányban megnyúltak, közel ellipszis alakúak. Tehát megállapítható, hogy a párkorrelációs függvények alapján a szerkezet transzverzálisan izotróp, míg longitudinálisan anizotróp.



5.8. ábra — A $P_{00}(\mathbf{r})$ mátrix-mátrix párkorrelációs függvény Z tengelyre merőleges (balra) és Z tengellyel párhuzamos (jobbra) metszete nívóvonalas ábrázolásban. Az egyes nívóvonalakhoz tartozó értékeket vonaltípus szerint feltüntetjük. A statisztikusan korrelálatlan tartományt kékkel színeztük.

A legnagyobb értéknívó a középpont, a (0,0) pont körül van, és az $1 - f_V = 0,8$ értéket veszi fel, míg a kékkel jelölt tartományban az $(1 - f_V)^2 = 0,64$ értéket veszi fel a (72)

aszimptotikus kifejezéseknek megfelelő módon. Azaz a késsel jelölt területet tekinthetjük korrelálatlan tartománynak, hiszen ebben a tartományban már a statisztikus átlagnak megfelelő a párkorrelációs függvény értéke, azaz statisztikusan nincs korreláció két elegendően nagy távolságban lévő pont között. Ebből az elemzésből tehát leolvashatunk irányonként egy-egy korrelációs hosszt. A longitudinális síkokban Z irányban vett korrelációs hossz $\ell_L \approx 28 \mu\text{m}$, míg a transzverzális síkban mind az X, mind Y tengely irányában $\ell_T \approx 23 \mu\text{m}$. Azaz az ebből származtatható úgynevezett anizotrópia faktor $\alpha = \ell_L/\ell_T \approx 1,22$, és ez az arány adódik átlagosan a közbenső nívók méretarányára. Ez az α érték még a gyenge anizotrópia tartományához tartozik.

Az erős korreláltságú tartomány alapján meghatározhatunk a geometriai elrendezésre egy reprezentatív térfogatot, amely lineáris méreteit célszerűen a korrelációs hosszak kétszeresével adhatunk meg, így biztosítva azt, hogy egy ilyen térfogat közepe és széle szerkezetileg statisztikusan korrelálatlan legyen, azaz az esetlegesen megszabott peremfeltételek elhanyagolható mértékben befolyásolják egymást. Tehát egy kb. $46 \times 46 \times 56 \mu\text{m}^3$ ($25 \times 25 \times 30$ voxel) nagyságú geometriailag reprezentatívnek tekinthető térfogatot kapunk.

Azonban jobban megvizsgálva a függvényt látható, hogy a korrelálatlan tartomány szélét jelző nívóvonal nem sima, amelyet a nagy statisztikai hiba okoz. Célszerű a nagyobb térfogatú (512-es) rekonstrukcióból nagy mintavételezés mellett is megvizsgálni ezeket a párkorrelációs függvényeket a korrelálatlan tartomány határán. (Mint jeleztük korábban, ennél a kiértékelésnél a rekonstrukcióban lévő kisebb hibák statisztikusan elhanyagolható hibát okoznak.) A kiértékelést távolságlépésként 100 millió mintavételi pontpár véletlenszerű kiválasztásával végezve már sokkal pontosabb függvényalakot kaphatunk, amelyeket most összehasonlítóként csak a transzverzális (X) és a longitudinális (Z) irányban határoztunk meg, így egyváltozós függvényként ábrázolhatjuk ezeket (5.9 ábra). Mivel a kétpont-függvényekre nyilvánvalóan igaz, hogy

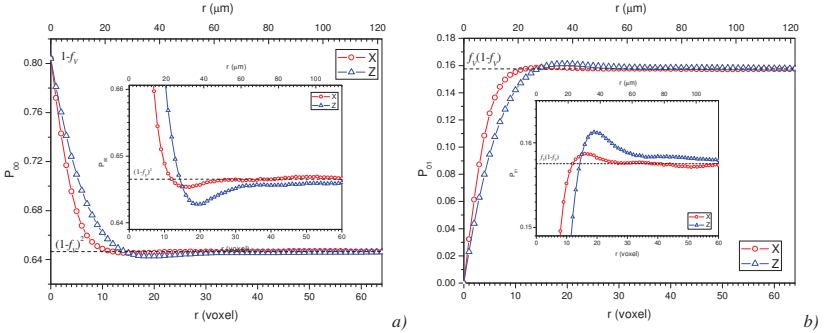
$$(204) \quad P_{00}(r) + P_{01}(r) + P_{10}(r) + P_{11}(r) = 1,$$

továbbá

$$(205) \quad P_{01}(r) = P_{10}(r),$$

így két függvényt alkalmasan kiválasztva a többi függvény is megadható, ezért az ábrákon a $P_{00}(r)$ -t és $P_{01}(r)$ -t ábráztuk. Az egyes pontok relatív hibája átlagosan $5 \cdot 10^{-5}$ nagyságrendűnek adódott, amelyet úgy határoztunk meg, hogy mind a négy kétpont-függvényt meghatároztuk az adott mintavétel mellett, és vizsgáltuk (204) teljesülését. Ezzel a pontossággal már jól megfigyelhető, hogy az eleinte gyorsan változó valószínűségfüggvény az aszimptotikus értékhez lassan közeledik, sőt át is lépi azt, s csak ezután konvergál. Ezt az átlépő szakaszt antikorreált tartománynak fogjuk hívni, mivel itt valószínűségi értelemben ellentétes korrelációról van szó, mint az erős korrelációt mutató kezdeti szakaszban. Ezeket a tartományokat egy kinagyított skálán is mutatjuk. Általánosságban a párkorrelációs függvények szabályos részecskékből — például egyező gömbökből — felépülő szerkezetek esetén erősen oszcillálva tartanak az aszimptotikus

értékhez, míg szabálytalanabb szerkezetek esetén ezek az oszcillációk nem jelentősek. A nagyított ábrán jól kivehető, hogy az első nagyobb túllövés után már csak jóval kisebb oszcillációk következnek, amelyek már nagyságukban megközelítik a statisztikus hibát.



5.9. ábra — A $P_{00}(r)$ (a) és $P_{01}(r)$ (b) kétpont-korrelációs függvények egydimenziós metszete a transzverzális (X), illetve longitudinális (Z) irányban az 512-es térfogat esetén függvényértékenként 100 millió véletlen pontpárra végzett statisztika alapján. Az aszimptotikus értékeket szaggatott vonallal jelöltük. A beszűrt ábrákon a korrelált és korrelálatlan tartomány közötti antikorrelált tartományra nagyítottunk rá.

A transzverzális és longitudinális irányban vett kétpontfüggvények különböző meredekséggel indulnak. A $P_{00}(r)$ esetén (77) értelmében a kezdeti meredekség a fajlagos felülettel kapcsolatos, tehát a várakozásnak megfelelően a transzverzális irányban nagyobb abszolút értékű meredekséget kaptunk, mivel a transzverzális irányú vetülete nagyobb a megnyúlt részecskék felületének, mint a longitudinális vetülete. Azonban, ha valóban a fajlagos felület szeretnénk meghatározni, akkor izotrópnak kell feltételeznünk az anyagot (77) alkalmazásához. Mivel kis mértékű anizotrópiáról beszélünk, ezt közelítőleg megtehetjük, akkor az 5.10. ábrán látható kétpontfüggvényt kapjuk. Ekkor a fajlagos felület nagyságára $s \approx 102\,000\text{ m}^{-1}$ adódik, azaz egy 1 literes kompozittérfogatban 102 m^2 kerámia–fém határfelület van. Ebből az adatból könnyen származtathatunk a részecskékre vonatkozó r_{ekv} ekvivalens gömb sugarat úgy, hogy egy kellően nagy V térfogatú kompozitban lévő N számú részecske térfogatára

$$(206) \quad f_v \cdot V = N \cdot \frac{4}{3} r_{ekv}^3 \pi,$$

és s fajlagos felületére

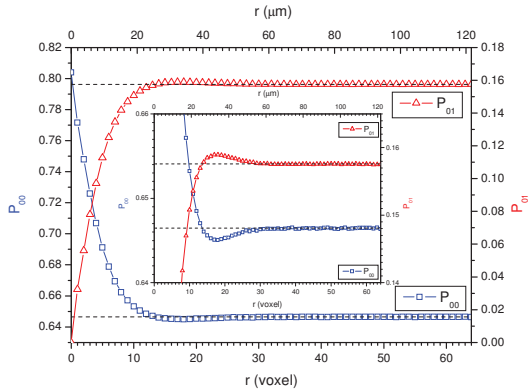
$$(207) \quad s = \frac{N \cdot 4r_{ekv}^2 \pi}{V}$$

felírt egyenletekből az

$$(208) \quad r_{ekv} = \frac{3f_v}{s}$$

összefüggést kapjuk. Az adatokat behelyettesítve $r_{ekv} \approx 5,9\ \mu\text{m}$ adódik, amely viszonylag jó egyezést mutat a direkt módon az átlagos részecsketérfogatból kapott ekvivalens gömbátmérő

értékével, holott ezt egy teljesen eltérő, statisztikus módszerrel számítottuk. Az alulbecslés nyilvánvalóan azzal magyarázható, hogy a gömbökhöz képest az ellipszoidoknak nagyobb a fajlagos felületük.



5.10. ábra — A $P_{00}(r)$ (bal oldali tengely) és $P_{01}(r)$ (jobb oldali tengely) kétpont-korrelációs függvények izotrop anyag feltételezve az 512-es térfogat esetén függvényértékenként 100 millió véletlen pontpárra végeztet statisztika alapján. Az aszimptotikus értékeket szaggatott vonallal jelöltük. A beszűrt ábrán a korrelált és korrelálatlan tartomány közötti antikorrelált tartományra nagyítottunk rá.

Érdeemes a korrelációs hosszakat és az anizotrópiát jellemezni az 5.9. és 5.10. ábrák grafikonjai alapján. Az aszimptotikus érték első átmetszésének helyét (a gyengén antikorrelált tartomány kezdetét) és az aszimptotikus érték megközelítésének helyét (a korrelálatlan tartomány kezdetét) számszerűen az 5.1. táblázatban foglaltuk össze. Ezek az értékek a különböző irányban (transzverzális és longitudinális) vett, illetve az átlagos (izotrop feltételezés) korrelációs hosszaknak feleltethetők meg. Az első átmetszés helyéből az erős szerkezeti korreláció méretskáláját, míg az aszimptotikus értékből a nagyobb (durván kétszeres), gyenge antikorrelációval együtt értelmezett korrelációs hosszat olvashatjuk le. Megállapítható, hogy az izotrop függvénynél csak egy oszcilláció jelenik meg, így a korrelálatlan tartomány kezdetét önkényes definíció alapján az első oszcilláció végéből határozzuk meg mindegyik grafikonon.

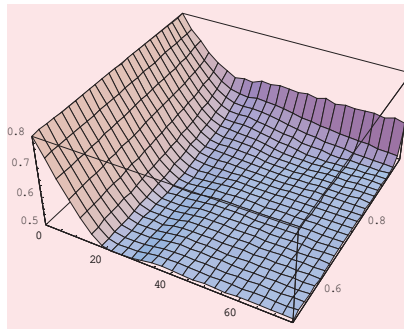
Ha ezekből a geometriailag reprezentatív térfogat méretére becslést akarunk adni, akkor jó megközelítés az erős korrelációkból adódó korrelációs hosszát megkétszerezni, azaz $46 \times 46 \times 56 \mu\text{m}^3$ adódik, mint fent, illetve ha a gyenge antikorrelációt is figyelembe vesszük, akkor ez a kétszerezés nem szükséges, és ekkor $51 \times 51 \times 64 \mu\text{m}^3$ adódik. Ez utóbbi valamivel nagyobb térfogatot jelent, de valószínűleg már számottevő változást nem okozna egy numerikus szimuláció esetén a szerkezet jellemzésekor.

Kétpontfüggvény		Antikorrelált tartomány kezdete (μm)	Korrelálatlan tartomány kezdete (μm)
Transzverzális	P_{00}	22,8	51,3
	P_{01}	22,8	51,3
Longitudinális	P_{00}	27,2	62,7
	P_{01}	27,2	64,6
Izotróp	P_{00}	25,7	57
	P_{01}	26,1	57

5.1. táblázat — Az 5.9. és 5.10. ábrák grafikonjairól leolvasható karakterisztikus adatok

5.2.6 Hárompont-valószínűségi függvények

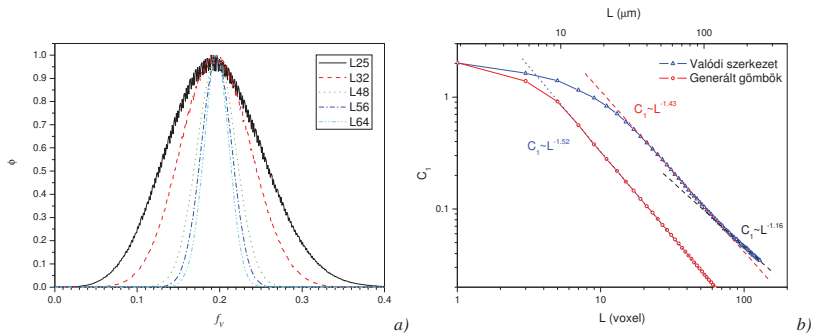
A hárompont-valószínűségi függvények statisztikusan homogén anyagra hatváltozós függvények, amennyiben a statisztikus izotrópia is teljesül, akkor háromváltozósak. Ezek szemléltetése, illetve vizsgálata bonyolult. Mivel az értekezésben nem fogunk részletesen foglalkozni ezekkel a függvényekkel, eltekintünk az analízisüktől. Azonban megjegyezzük, hogy ezen függvények metszeit meghatározva a kétpont-valószínűségi függvényeket kapjuk, továbbá teljesülnek a (73) és (74) aszimptotikus tulajdonságok. A függvény jellegének illusztrálásaként az izotrópia feltételezésével, a rekonstruált térfogaton numerikusan meghatározott függvény speciális esetét, a $P_{000}(r, r, \cos(\theta))$ függvényt ábráztuk az 5.11. ábrán, ahol a képzeletbeli próbaháromszögek origóból induló két szárának hosszát az r sugár adja meg, és a közöttük lévő szöveget pedig θ . A $\cos(\theta) = 1$ esetben éppen az izotróp P_{00} kétpontvalószínűségi függvényt kapjuk meg. Leolvasható, hogy a függvény origó közeli tartományában a lecsengése annál erőteljesebb, minél nagyobb a két szár által közbezárt szöszög.



5.11. ábra — Illusztráció a hárompont-valószínűségi függvény alakjának bemutatásához, izotróp esetet feltételezve. A bal oldali alsó tengelyen az r sugár voxelben kifejezve, a jobb oldali alsó tengelyen a $\cos(\theta)$ értéke van feltüntetve, a függőleges tengely a $P_{000}(r, r, \cos(\theta))$ függvény értékeit mutatja.

5.2.7 A lokális változatosság, szerkezeti durvaság

A szerkezeti durvaságot a 2.2.5 alfejezetben bevezetett mennyiségekkel jellemezhetjük. Azaz a rekonstruált térfogaton meg kell határozni különböző ablakméretek esetén a lokális térfogati hányadot. Konvencionálisan egy L élhosszúságú kockát választunk ablak gyanánt. Ennek kiszámolásához az 512-es térfogatot használhattuk, hiszen ismét nem számítanak a nagy statisztikus mintavétel miatt a kisebb rekonstrukciós hibák. Az ablakokat véletlenszerűen választjuk ki a rekonstruált térfogattól, és — hogy a mintavétel egyenletes legyen — ciklikusan megismételjük a térfogatot egymás után. Ekkor a különböző ablakméretekre a térfogati hányad már tárgyalt variabilitása miatt egy-egy eloszlásfüggvényt kapunk, amelyeket — a későbbiekben is használt modellméretekre — az 5.12a ábrán mutatunk. A jobb statisztikájú, így simább vonalú függvények megrajzolásához 10 millió véletlen mintavételt vettünk. Leellenőrizve, hogy ezek az eloszlásfüggvények Gauss-függvények-e, úgy találtuk, hogy az $L = 32$ voxeles ablakmérettől kezdve a nagyobb ablakok esetén már mind nagyon jó közelítéssel, míg az ennél kisebb ablakok esetén nem illeszthetők jól Gauss-függvénnyel.



5.12. ábra — A 25, 32, 48, 56 és 64 voxel élhosszúságú ablakok esetén mért lokális térfogati hányad l -re normált eloszlásfüggvényei (a) és a szerkezeti durvaság-paraméter az ablakok élhosszúságának függvényében (b) logaritmus skálán. Feltüntetjük a generált gömbszerkezet esetén kapott függvényt is.

A lokális térfogati hányad variabilitásából, azaz az eloszlásfüggvények szélességéből kiszámíthatjuk a szerkezeti durvaság-paramétert a (82) definíció szerint, majd ezt ábrázolhatjuk log-log skálán a mintavételi ablakok élhosszúságának függvényében (5.12b ábra). Ekkor (87) értelmében nagy ablakméretek esetén egyenest kell kapnunk. A görbe kezdőpontjának (84) szerint 2,02-ről kell indulnia, majd a kezdeti tranziens után egyenessé kell válnia. Erre a szakaszra illesztett egyenes meredeksége $-1,43$, amely nagyobb, mint az elméletileg jósolt $-1,5$, ami statisztikusan homogén ergodikusra jellemző. Továbbá a nagyobb megfigyelési ablakokra a függvény eltér ettől az egyenestől és $-1,16$ meredekségűvé válik. Ez utóbbi viselkedés magyarázható azzal, hogy térben ciklikusan ismételtük a térfogatot. Az viszont kétségtelen, hogy a valódi anyag szerkezete úgy tűnik, nem teljesíti az ergodikusság hipotézisét. Ez az eltérés eredhet abból, hogy a valódi kompozit nem tökéletesen homogén a vizsgált skálán tekintve.

Korábban megmutatták, hogy ha a sajtolási irányra merőlegesen vett síkmetszeten a részecskék felületi hányada két fajta fluktuációt mutat: egy 25–30 voxel (50–60 μm) és egy nagyságrendileg milliméteres hullámhosszút [23]. Valószínűleg ez a hosszabb hullámhosszú fluktuáció okozza a szerkezeti durvaságban az eltérést. Valószínűsíthető, hogy ez a hosszabb hullámhosszú fluktuáció a gyártási eljárás, mégpedig a sajtolás során keletkezik az anyagban, a mechanikus rezgések a magas hőmérsékletű, képlékeny kompozitot szerkezetileg könnyen megváltoztathatják. Érdekesképpén feltüntetünk egy 20%-os térfogati hányaddal generált véletlen merevgömbmodellre vonatkozó szerkezeti durvaság ablakméretfüggését is a valódi szerkezet mellett, ennek lecsengésére közelítőleg az elméletileg várt hatványkitevőt kapjuk. A gömböket ugyanazon a voxelrácon generáltuk, és így 11,4 μm átmérőjű monodiszperz rendszert építettünk fel.

A szerkezeti durvaság, azaz a lokális fluktuációk alapján ismét becsülhetünk egy ℓ korrelációs hosszát, amelyet (86) kapcsán vezetünk be. Ezt az 5.12b ábrán látható illesztett egyenes és a görbe kezdeti szakaszának találkozási pontjával becsülhetjük, amely $\ell = 38 \mu\text{m}$ -nek adódik. Figyelembe véve, hogy a merevgömbmodellre $\ell_{\text{gömb}} = 13,3 \mu\text{m}$ -nek adódik, amely valamivel nagyobb, mint a gömbök átmérője, gyanítható, hogy a részecskemérettel és a szorosan a részecskéhez tartozó mátrixszal áll kapcsolatban ez a típusú korrelációs hossz. E megállapítás alapján viszont szembetűnő a lokális térfogatokra kapott legnagyobb átlagos méret és e korrelációs hossz igen jó egyezése. Érdeemes megfigyelni, hogy a 2.4.2 alfejezetben tárgyalt Drugan- és Willis-féle számításokból az Al mátrixú Al_2O_3 kerámia részecskékkel erősített kompozit gömbmodelljére kapott analitikus eredmények a 2 és 5%-os hibakorlát esetén meglepően jó egyezést mutatnak a rácson vett gömbökre imént kapott korrelációs hosszal. Azonban az előbbi számításokban az anyagi tulajdonságok is szerepelnek, a korrelációs hossz pedig csak a szerkezeti adatok határozzák meg.

5.2.8 Összefoglalás a szerkezeti adatokról

Az ebben a fejezetben tárgyalt szerkezeti jellemzők könnyebb áttekinthetősége kedvéért táblázat formájában is összegezzük a fontosabb karakterisztikus méreteket és korrelációs hosszakat (5.2. táblázat). Megjegyezzük, hogy a rekonstrukció felbontása ugyan 1,9 μm , azonban az átlagos értékek lehetnek ennél pontosabbak is, ezért tüntettünk fel tizedes értékeket is a mikrométerben kifejezett méretek esetén.

Szerkezeti jellemző	X	Y	Z
Részecskék középpontok átlagos távolsága [23]	13,8 μm		
Részecskék ekvivalens gömbátmérője	14 μm (13,3–15,7 μm)		
Részecskék ekvivalens gömbátmérője fajlagos felület alapján	11,8 μm		
Részecskék átlagos tengelyei a lognormális eloszlás alapján [23]	6,6 μm	12,0 μm	18,4 μm
Átlagos részecskeméret az ellipszoidillesztés alapján	9,2 μm	14,8 μm	22,0 μm
Lokális térfogat átlagos méretei az ellipszoidillesztés alapján	19,8 μm	27,2 μm	37,6 μm
Alakfaktor	0,19		
Anizotrópia faktor	1,22		
Átlagos részecskekarcsúság	1	1,66	2,46
Lokális térfogatok átlagos karcsúsága	1	1,40	1,93
Korrelációs hossz a $g(r)$ függvény alapján [23]	25–30 μm		
Korrelációs hosszak az egyenesúthossz-függvényből [23]	43 μm	43 μm	63 μm
Korrelációs hosszak $P_{00}(\mathbf{r})$ kontúrok alapján	23 μm	23 μm	28 μm
Korrelációs hosszak $P_{00}(\mathbf{r})$ erősen korrelált tartománya alapján	22,8 μm	22,8 μm	27,2 μm
Korrelációs hossz $P_{00}(\mathbf{r})$ gyengén antikorrelált tartománya alapján	51,3 μm	51,3 μm	62,7 μm
Korrelációs hossz szerkezeti durvaságból	38 μm		

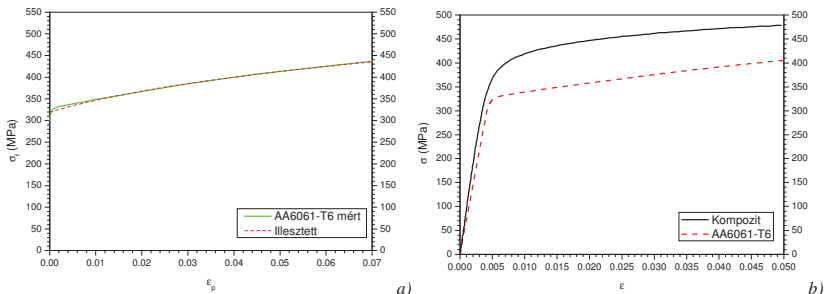
5.2. táblázat — A fontosabb szerkezeti jellemzők a különböző irányokban. Itt X, Y és Z rendre mind a transzverzális és longitudinális irányokat, mind a legkisebb, közepes és legnagyobb méret irányát jelöli.

6 Modellezés végeelemmédszerrel

A 3. fejezetben bemutatott végeelemmédszer és az 5. fejezetben tárgyalt szerkezeti információk alkalmazásához a modell fizikai paramétereit kell először tisztázni. Az Al_2O_3 részecskék rugalmas tulajdonságait (Young-modulus: 380 GPa, Poisson-szám: 0,22), valamint az alumíniumötvözet rugalmas tulajdonságait (Poisson-szám: 0,30) anyagmechanikai táblázatok alapján állapítottuk meg, a fémátlós képlékeny tulajdonságait leíró alakítási görbét pedig az ötvözetben elvégzett — a kompozit előállítási körülményinek megfelelő — hőkezelések utáni egytengelyű összenyomási mérések alapján határoztunk meg. Ebből megkaptuk az erősítőfázis nélküli mátrixanyag Young-modulusát, ami 72,3 GPa-nak adódott. A végeelemprogramnak a képlékeny deformációhoz tartozó folyásfeszültségekre van szüksége az adott képlékenységi modell alkalmazásához, ezt mutatja a 6.1a ábra.

A modellek által szolgáltatott eredményeket összevetjük a kompozit alakítási görbéjével, amelyet szintén egytengelyű összenyomási mérések alapján határoztunk meg (6.1b ábra). Itt jegyezzük meg, hogy a feltüntetett alakítási görbék összenyomási deformációt és feszültséget ábrázolnak, amelyeket itt és a továbbiakban pozitív előjelűnek veszünk, ellentétben az ekkor szokásos negatív mennyiségekkel. Továbbá megmértük a kompozitminta Young-modulusát a sajtolási iránnyal párhuzamos és arra merőleges irányban is. A mérések elvégzéséhez a gyártó által adott rúdból 8 mm átmérőjű hengeres mintákat vágunk ki. A kompozit gyakorlati felhasználási állapotát 560 °C-os hőmérsékleten 30 perces oldó hőkezeléssel, szobahőmérsékletű vízben történő edzéssel, majd 165 °C-os olajfürdőben 16 órán át tartó mesterséges öregítéssel (megeresztéssel) alakítottuk ki. Ez megfelel a kompozit csúcsmennyiségűre öregített (T6-os) állapotának. Ezután a mintát mechanikai polírozásnak vetettük alá, ezzel a kialakult oxidréteget eltávolítottuk a minta felszínéről.

A méréseink alapján a kompozit Young-modulus értékére a sajtolás irányában 98 ± 2 GPa, míg a rá merőleges irányban 94 ± 2 GPa adódott. Ugyanezen az anyagon fázisátviteli kísérletek alapján 98 ± 1 GPa-t mértek a sajtolás irányában [14].



6.1. ábra — a) Az AA6061-T6 alumíniumötvözet folyásfeszültség–képlékeny alakítási görbéje az illesztett függvényvel (lásd később). b) Egytengelyű összenyomással felvett alakítási görbe a kompozit és az erősítőfázis nélküli mátrixanyag esetén.

6.1 A végelelemmodellek általános felépítése

A végelelemszoftverrel a 2.1.2 fejezetben tárgyalt rugalmas-képlékeny anyagmodell alkalmaztunk. Azonban a kompozitok alakítása közben igen fontos jelenség az anyagkárosodás, amely például a nyújtás során bekövetkező részecsketöréseknek, illetve mátrix-részecske határfelület leszakadásoknak köszönhető. Mivel kismértékű összenyomási terhelés esetén a gyakorlatban nem tapasztaltak anyagkárosodást, ilyen típusú viselkedést a modellekben nem vettünk figyelembe, és elsősorban a 2%-os alakításig terjedő tartomány leírására összpontosítottunk. Továbbá a szimulációkban egytengelyű összenyomási terhelést modelleztünk, így a kísérleti görbével összehasonlítható eredményeket kaptunk.

A végelelemmodellek határfeltételeinek megszabása kulcsfontosságú, ezért a 3.1.7 alfejezetnek megfelelően a végtelen kiterjedésű anyagban kiszemelt térfogat modelljének megvalósításához a végtelen anyag felé eső határfelületeken kinematikai határfeltételeket szabtuk meg: a felületi csomópontok felületre merőleges elmozdulásából származó szabadsági fokait összekötöttük, így csak együttesen, a közös síkjukban mozdulhatnak el. Az alakváltozást létrehozó alsó és felső síkon pedig a képzeletbeli ideális anyagvizsgáló gép által létrehozott határfeltételt szabtuk meg, azaz az alsó lapot lerögzítettük az alapsíkhoz, a felületi csomópontok csak ebben a síkban mozdulhattak el; a felső lapot a mozgó keresztfej nyomósíkjához rögzítettük, ennek megfelelően a felületi csomópontok csak ebben a mozgó síkban mozdulhattak el. Megjegyezzük, hogy hatását tekintve tükörhatárként viselkedik az összenyomást biztosító határfelület.

A mátrix képlékeny anyagmodelljét a csúcskeménységre öregített alumíniumötvözet kísérleti összenyomási deformációs görbéje (6.1a ábra) alapján vett folyásfeszültség–deformáció összefüggéssel, valamint a (38) von Mises-féle folyásfeltétellel vettük figyelembe. A végelelemszoftverben lehetőség van saját szubrutinból megadni a szimuláció adott pillanatában az adott végeelemre érvényes folyásfeszültséget és a (40) szerinti alakítási keményedést, ezért célszerű volt az alumíniumötvözet numerikus adatokból álló képlékeny alakítási görbéjére

$$(209) \quad \sigma_f = A |\varepsilon_p + \varepsilon_c|^b$$

alakú folytonos függvényt illeszteni, és ennek segítségével analitikusan megadni a folyásfeszültséget akár a mérésben már nem szereplő deformációtartományokra is a

$$(210) \quad H = Ab |\varepsilon_p + \varepsilon_c|^{b-1}$$

alakítási keményedéssel egyetemben. Ezt a σ_f illesztett függvényt ábráztuk a 6.1a ábrán. A kerámiafázist lineárisan rugalmas anyagként kezeltük, hiszen a modellezés során nem várhatóak a részecskékben akkora feszültségek, amelyek elérnék a kerámia folyáshatárát, ezért az irodalmi rugalmasságtani adatait használtuk.

A kompozitmodell szimulációjakor figyelembe vettük azt is, hogy a valódi anyag utolsó hőkezelése a csúcsra öregített állapot kialakításához 165 °C-on történik, amelyről a kompozitot szobahőmérsékletre lehűtve maradó termikus belső feszültségek keletkeznek. Ezen kezdeti feszültségek meghatározására a mechanikai összenyomás szimulációját egy hűtési szimuláció előzte meg. A hűtési szimulációban figyelembe vettük a fajhő, a hővezetési tényező és a hőtágulási együttható hőmérsékletfüggését is, hogy minél realisztikusabb kezdeti belső feszültségeket tudjunk figyelembe venni a mechanikai szimulációkban. Azonban ezek a termikus szimulációk jelentősen megnövelik a modellek teljes futtatási idejét, ezért ezeket csak indokolt esetben hajtottuk végre. Ugyanis a kezdeti termikus belső feszültségek a rugalmas tulajdonságokat nem befolyásolják, azonban a lokális folyásfeszültségek elérésében lehet szerepük, tehát a képlékeny tulajdonságokra hatással lehetnek. Ezeket az eseteket külön megvizsgáljuk.

A végeelemmodelleket izoparametrikus elemekből építettük fel, amelyek legtöbbször trilineáris interpolációs függvényeket használnak a gyors számíthatóság kedvéért. A mátrixelemekre a merevségi mátrix állandó deformációs, míg a kerámiarészecskék elemeire a feltételezett deformációs felírást használtuk [21]. A számítások során relatív konvergenciavizsgálatot alkalmaztunk, és ekkor a reziduális erő nagyságát 1%-os pontossággal követeltük meg. Ezen végeelemekből úgy számítottuk a modellre vonatkozó makroszkopikus paramétereket, hogy a pillanatnyi térfogatukkal súlyozva átlagoltuk a kérdéses mennyiséget (pl. deformációkomponens, feszültségkomponens).

6.2 Technikai információk

Az elegendően nagy anyagi térfogatot kezelni tudó végeelemmodell számítás és tárolókapacitás igénye igen nagy. Ezért a végeelemsoftver futtatásához kellően nagy teljesítményű hardver szükséges. A kutatómunka elvégzésekor egy HP J6000 Visualize Workstation állt rendelkezésünkre, amely két darab 64 bites PA-RISC architektúrájú processzort, 13 GB RAM-ot tartalmazott SCSI merevlemez adattárolókkal. A számítógépen HP-UX 11i operációs rendszer futott, amely alatt az MSC.Marc/Mentat programrendszer a párhuzamos futtatási lehetőségeket ki tudta használni. A programhoz kiegészítő szubrutinokat írtunk Fortran nyelven (fejlesztési kódnév: fast_feszdef_therm_ddm), amelyek a szimuláció közben kiszámították a feladat szempontjából érdekes fizikai paramétereket, majd szöveges állományokba írták. Ezeket a szöveges állományokat dolgoztuk fel és értékeltük ki a későbbiekben. Az MSC.Marc/Mentat programok verziószáma a kutatómunka során többször változott, kezdetben a 2001-es, majd a 2003-as és 2003r2-es, végül a 2005-ös verziót használtuk. A program ezek során sok újdonsággal bővült, azonban számunkra a hatékonyabb szolvek és a tömörebb, gyorsabb adattárolási mechanizmusok megjelenése számított, így lehetővé vált nagyobb, összetettebb modellek futtatása is.

A végeelemmodellek előállításához szükséges, az MSC.Mentat saját nyelvén készült forráslistákat egy C nyelven írt program (procmake) állította elő a rekonstrukció során kapott háromdimenziós voxeleket tartalmazó bináris állományból. A sztatistikus szerkezeti információkat szolgáltató (mmcstat), a merevgömb-modellt generáló (ellipgen), az egyrészesce modellek generálását (locmake), a speciális multiskála modellek generálását (locgen), előállítását (mmm_procmake) és szimuláció közbeni adatkezelését (mmm_feszdef_therm_ddm_h20) végrehajtó C nyelven írt programok végezték. A felsorolt segédprogramok saját fejlesztésűek.

A szimulációk és a szerkezetiértékelő programok futási ideje széles skálán változott. A leghosszabb szimuláció két hónapig, a leghosszabb szerkezetiértékelő rutin egy hónapig futott.

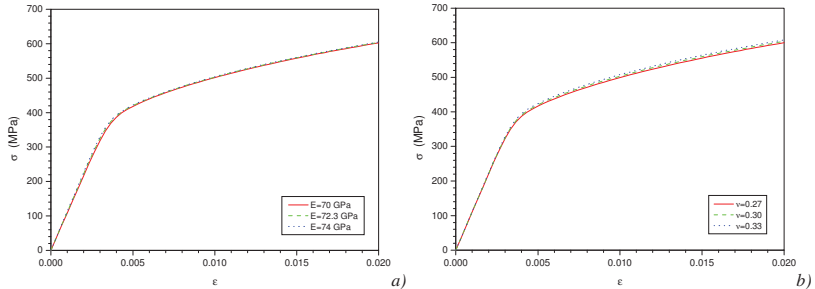
6.3 Statisztikus (átlagolási) módszerek

Ebben az alfejezetben azokat a modellezési lehetőségeket ismertetjük, amelyek a statisztikus szerkezetanalízis adatai alapján építhetők fel és átlagos tulajdonságokon alapulnak. A különböző módszereket a megvalósításhoz szükséges szerkezeti információ mennyisége, és a megelőző eredményekre való alapozás szerinti sorrendben tárgyaljuk.

Előjáróban azonban röviden kitérünk arra a kérdésre, amely felmerül a modelleredmények értelmezése során, hogy a 6. fejezet bevezetésében említett bemeneti paraméterek mennyiben befolyásolják a modellek által szolgáltatott eredményeket. A legnehezebben mérhető adatok a rugalmas állandók, és ezekre valóban többféle adatot is találtunk táblázatokban. A legegyszerűbb ellenőrzést úgy végeztük, hogy egyszerre csak egy rugalmas állandót változtattunk meg, majd vizsgáltuk a szimuláció kimeneteként kapott alakítási görbe megváltozását. Külön-külön a mátrixanyag Young-modulusát, majd Poisson-számát változtattuk, hiszen a nagyobb térfogati hányadnak megfelelően ezek hatása elsődleges. Mindezeknek megfelelően a Young-modulust 70 és 74 GPa, illetve a Poisson-számot 0,27 és 0,33 között változtattuk egy olyan közvetlen modellben, amely a rekonstruált térfogat kezdősarkából kivágott 32^3 voxel nagyságú részt tartalmazott, majd a modelleredményeket összehasonlítottuk. Ezeket az alakítási görbéket tartalmazza a 6.2. ábra.

Az adatokból leolvasható, hogy a Young-modulus kb. 3%-os megváltoztatása a 2%-os deformációnál leolvasható feszültségben mindössze kb. 1,5 MPa, azaz kb. 2,5%-os különbség tapasztalható, továbbá a Poisson-szám 10%-os megváltoztatása ugyanebben a feszültségértékben aszimmetrikusan kb. +1,5 MPa, de -6 MPa, azaz kb. +2,5%, de -1,1%-os változást okozott. A Young-modulus megváltozása várhatóan erősebben befolyásolta az egytengelyű összenyomásra vonatkozó alakítási görbét, elsősorban a kezdeti rugalmas szakaszt, ezért változtattuk csak kis mértékben, míg a Poisson-szám megváltozása várhatóan nem a rugalmas felfutásban, hanem inkább a képlékeny szakaszban okoz másodlagos hatást, ezért mutattunk példaként nagyobb különbségeket. Ezért érdemes a rugalmas anyagi választ is megvizsgálni. Az adatokból azt kapjuk, hogy a mátrix Young-modulusának megváltoztatása kb. $\pm 2,5$ GPa, azaz kb. 2,3%-os változást,

míg a Poisson-szám megváltoztatása kb. 0,5 GPa, azaz 5%-os változást okoz a kezdeti szakasz Young-modulus értékében.



6.2. ábra — A Young-modulus (a), illetve a Poisson-szám (b) megváltoztatásával kapott modellszámítások. A zöld szaggatott görbe az általunk alkalmazott anyagi paraméterekkel kapott görbét jelöli.

Mindezekből levonható az a következtetés, hogy az adatok kismértékű bizonytalansága kis hibát okoz a modellszámításokban, és a hiba nagysága erősen függ a kérdéses mennyiség jellegétől. Tehát a Poisson-szám viszonylag nagyobb mértékű megváltozása sem befolyásolja lényegesen a kapott modelleredményeket, míg nyilvánvalóan a Young-modulus megváltozása karakterisztikusabban megjelenik az egytengelyű deformációban kapott Young-modulus értékében. A fentiekhez kapcsolódóan meg kell jegyeznünk, hogy a Poisson-számra vonatkozó adatok általában bizonytalanabbak, míg a Young-modulust viszonylag pontosan ismerjük.

6.3.1 Az átlagolásiablak-módszer [S1]

6.3.1.1 A módszer elve

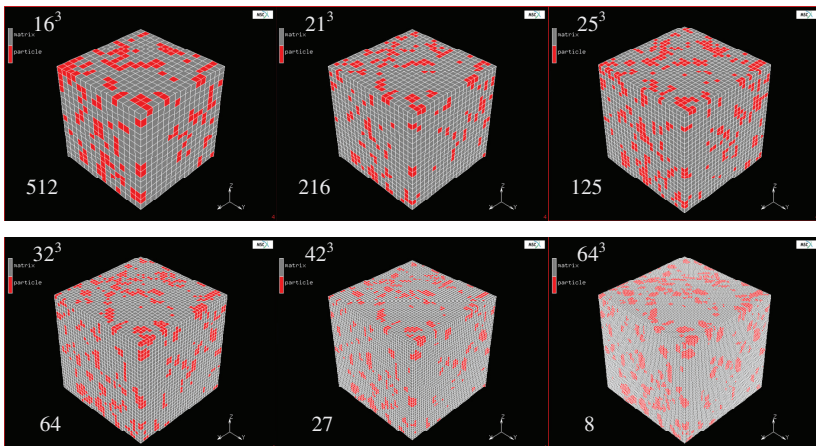
A modellezéshez a rendelkezésünkre álló előfeldolgozott, binarizált 243 μm élhosszúságú, kocka alakú 128^3 voxelből álló rekonstruált kompozitszerkezetet használtuk (5.1a ábra). Ez az élhosszúság körülbelül 9–10-szer nagyobb a mikroszerkezetre jellemző, a kétpont-függvényekből kapott korrelációs hossznál, ezért feltételezhetjük, hogy mechanikai viselkedés szempontjából ez a kivágott térfogat makroszkopikusan reprezentatív.

A módszer kiinduló feltételezése az, hogy a valódi kompozit szerkezetről rendelkezünk egy elég nagy, azaz a geometriailag reprezentatív térfogatelemnél jóval nagyobb tomografikusan rekonstruált kompozitszerkezettel. Mivel egy ekkora térfogat közvetlen modellezésének számítási igénye a jelenlegi lehetőségeken jelentősen túlmutat, ezért ezt a térfogatot felosztjuk kisebb térfogatokra (háromdimenziós ablakokra, cellákra), melyeken belül a kompozit finomabb struktúráját átlagolással elmoszuk, majd ezt a kevésbé részletgazdag térfogatot építjük be a végeelemmodellbe. A legegyszerűbben ezt úgy tehetnénk meg, hogy amelyik fázisból több van az adott átlagolási ablakban, azzal helyettesítjük az egész ablakot. Azonban ekkor nyilvánvalóan döntően a mátrix fázisból lenne több a nagyobb térfogati hányadának köszönhetően, ezért a vágási

szintet egységesen úgy határoztuk meg, hogy a modell térfogati hányada a lehető legközelebb essen a kompozit névleges térfogati hányadához. Miatán az egyre finomodó felbontású modellekből származó eredményeket megkaptuk, megállapíthatjuk a tendenciát, amellyel a fizikai mennyiségek haladnak, és következtethetünk a kompozit makroszkopikus tulajdonságaira. Ez a modellezési stratégia feltételezi azt, hogy ha a tomografikus rekonstrukcióból származó minden egyes voxelnek megfeleltetnénk egy végeselemet, akkor viszonylag pontosan leírhatjuk a kompozit makroszkopikus viselkedését. Megjegyezzük, hogy a végeselemmodellek esetén általánosan tapasztalt jelenség, hogy a modellméret/felbontás növekedésével a kapott eredmények hibája tart az aszimptotikus értékhez. A módszert átlagolásiablak-módszernek neveztük el, angol nevén: averaging window method.

6.3.1.2 A módszer megvalósítása végeselemmodellel

Különböző átlagolásiablak-méretek alkalmazásával aszimptotikus modellezési stratégiát követünk úgy, hogy 6^3 , 5^3 , 4^3 , 3^3 , végül 2^3 voxelre vonunk össze egy cellává az eredeti szerkezetben (6.3. ábra). Az anyagi tulajdonságot (mátrix vagy részecske) a cella lokális kerámiatartalma alapján úgy rendeltük hozzá az egyes cellákhoz, hogy az így keletkező modellszerkezet átlagos térfogati hányada a 20%-os névleges értéket a lehető legjobban közelítse az összes modell esetén. Ebből az előállítási módszerből nyilvánvalóan adódik, hogy a valódi szerkezet annál jobb közelítést kapjuk, minél kisebb az átlagolási ablak mérete. Ez egyúttal azt is jelenti, hogy a végeselemmodellekben a finomabb közelítéskor sokkal több elem fog szerepelni, így a szimuláció futásideje is jelentősen megnő.

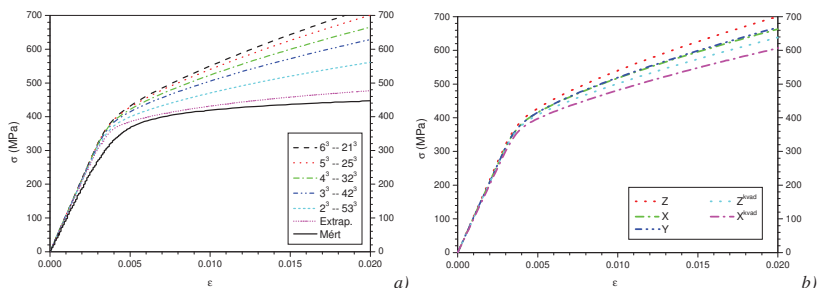


6.3. ábra — A különböző átlagolási ablakokkal létrehozott modellek. Az átlagolási ablakok mérete (balról jobbra haladva) 6^3 , 5^3 , 4^3 , 3^3 és 2^3 voxel, míg a modellek elemszámai rendre 21^3 , 25^3 , 32^3 , 42^3 és 64^3 . Megfigyelhető az egyes részecskék egyre finomabb kontúrja és részletesebb szerkezete, ahogyan az átlagolási ablak mérete csökken.

A kis felbontású modellben kapott részecskék alakja csak nagyon durván közelíti a valódit, előfordul például erősen konkáv részecske, amit nem figyelhetünk meg a valódi szerkezetben. A részecskék száma is erősen függ az alkalmazott átlagolásiablak-mérettől: az eredetileg 1277 részecskét tartalmazó térfogattól a legnagyobb, 6^3 voxel tartalmazó ablakméret esetén 316 részecske marad.

6.3.1.3 A kapott eredmények

Vizsgáljuk meg a különböző modellméretek esetén a sajtolási irányban történő összenyomás szimulációjakor kapott feszültség–deformáció görbéket (6.4a ábra)! Látható, hogy a kapott görbék első szakasza lineárisan fut a fémek rugalmas alakváltozásához hasonlóan, majd a képlékeny szakasz következik, egy erőteljes görbülés közbeiktatásával. Természetesen a fémátrixú kompozitok kis alakváltozása esetén is már történhet lokálisan képlékeny alakváltozás, azonban ez térfogati hányadát tekintve elhanyagolható, és így használhatjuk a görbe lineárisan futó kiinduló szakaszát (az első szimulációs lépést) a kompozit effektív Young-modulusának meghatározására. Másrészt jól nyomon követhető, hogy az egyre finomabb szerkezeti részleteket is figyelembe vevő modellek, egyre jobban közelítenek a kísérleti görbéhez. Nyilvánvaló a végeelemmodellek általános konstrukciójából adódóan, hogy a modellek mindig felülbecslik a feszültségeket. Az ábrán feltüntetettük a pontonként extrapolált görbét (lásd alább) is, amely úgyszintén valamivel a kísérleti görbe fölött halad.



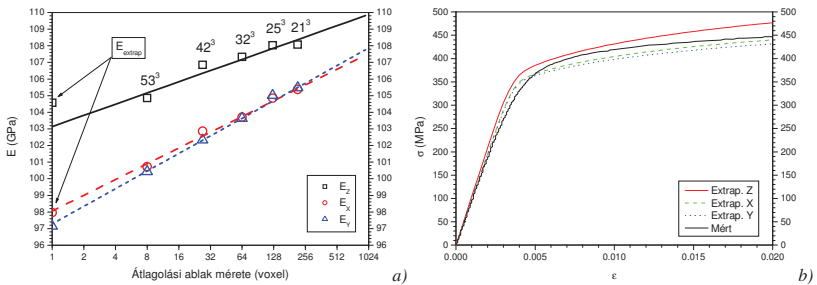
6.4. ábra — (a) A sajtolási irányban (Z) történő összenyomás során kapott szimulált feszültség–deformáció görbék különböző átlagolási ablakméretek esetén, illetve a pontonként extrapolált (lásd később) és a kísérleti görbe. A címke első száma az átlagolási ablak méretét jelenti voxelben, a második a modell méretét jelenti cellaszámban kifejezve. (b) 2^3 cella méretű (átlagolási ablak 5^3 voxel méretű) modell görbéi a három összenyomási irányban (Z, X, Y), trilineáris interpolációs függvények alkalmazásával, valamint trikvadrátikus interpolációs függvények alkalmazásával (Z^{kvad} , X^{kvad}).

A különböző összenyomási irányokban kapott alakítási görbék összehasonlításával (pl. a 2^3 cellaszámú modell esetét mutatja a 6.4b ábra) megfigyelhető, hogy a transzverzális irányokban kapott modellgörbék, mindig a sajtolási irányban kapott görbe alatt helyezkednek el. Továbbá már kis modellméretek, azaz nagy átlagolási ablakok esetén is a transzverzális irányokban kapott alakítási görbék szinte egymáson futnak, következésképpen a 5.2.5 alfejezetben tárgyalt transzverzális szerkezeti izotrópia a fizikai tulajdonságokban is tükröződik. Az egyre

kisebb átlagolási ablakok esetén a modellgörbék különbsége a transzverzális irányokban egyre csökken, 0,2% alatt marad.

6.3.1.4 Rugalmas tulajdonságok

A modellszerkezetre a három különböző irányban (X, Y és Z) számított makroszkopikus Young-modulusokat ábráztuk az átlagolási ablak méretének függvényében (6.5a ábra), amelyeket az egyes modellek feszültség–deformáció görbéinek kezdeti rugalmas szakaszából számítottunk ki. Megállapítható, hogy a Young-modulusok a sajtolási irányban (Z) rendre nagyobbak, mint az erre merőleges transzverzális irányokban (X és Y), amelyek viszont közel egyenlők. Ez utóbbi tulajdonság a szerkezeti izotrópia következménye. A modellekből számított Young-modulusoknak az átlagolási ablak mérete szerinti változása azt mutatja, hogy a vizsgált mérettartományban logaritmikus kapcsolat létesíthető közöttük. Mivel ez a kapcsolat fennáll, és az eredeti voxelméret közel van a legkisebb ablakmérethez, az 1 méretű ablakmérethez vett lineáris extrapolációval (logaritmikus skálán) a valódi szerkezet modulusát becsülhetjük. Az így kapott extrapolált Young-modulusok értékei $E_Z \approx 103$ GPa a sajtolás irányában, és $E_X \approx 98$ GPa , $E_Y \approx 97$ GPa a transzverzális irányokban.



6.5. ábra — (a) A három összennyomási irányban (X, Y és Z) kapott makroszkopikus Young-modulusok az átlagolási ablak méretének függvényében. Az extrapolációs egyenest szaggatott vonal jelöli. A pontok melletti számok a modell voxelben kifejezett méretét jelenti. Felütiintettük az extrapolációval kapott alakítási görbékről leolvasható Young-modulus (lásd később) értékeit is, teli szimbólumok jelölik. (b) A pontonként extrapolált feszültség–deformáció görbék az X, Y és Z irányban a kísérleti görbével összevetve.

A diagramon látható végeleselemszámításból kapott értékek alapvetően kétféle hibaforrás tartalmaznak. Egyrészt a modell felépítéséből (átlagolás az adott ablakméret esetén, extrapoláció) származó hibákat, másrészt a numerikus megoldás saját hibáját tartalmazza, amely főként a végeselemben alkalmazott interpolációs függvény megválasztásából ered. A transzverzális izotrópia előnyeit kihasználva becslést adhatunk a módszer elveiből fakadó hiba nagyságára, ami E_X és E_Y értékeit figyelembe véve körülbelül 1%-nak adódik. Ha feltételezzük, hogy az extrapoláció után az átlagolásból eredő hiba elhanyagolhatóvá válik, akkor csak a modellekben alkalmazott trilineáris interpolációs függvényekből származó hiba marad, amelyek nagyságát úgy becsülhetjük, hogy a sokkal pontosabb közelítést adó trikvadratikus interpolációs függvényekkel

is elvégezzük a számításokat. Azonban ezt a nagy számításgéniy miatt csak a kisebb méretű, 21^3 és 25^3 nagyságú modelleken tudjuk megvizsgálni (az utóbbit mutatja a 6.4b ábra). Mindkét modell esetén a Young-modulus értékére körülbelül 104 GPa-t kaptunk a Z, míg 101 GPa-t a transzverzális irányban, ami azt jelenti, hogy körülbelül 4%-kal kisebb érték adódott (108 és 105 GPa helyett), mint trilineáris interpolációs függvények alkalmazása esetén, azaz tekinthetjük ezt a szimuláció numerikus hibájának. Ez a hiba jó egyezést mutat az extrapolált értékek kísérleti eredményekkel történő összehasonlításával kapott hibával. Megjegyezzük, hogy (94)–(97) felhasználásával a Hashin–Shtrikman-határok értékére a vizsgált kompozit esetén 95 és 113 GPa-t kapunk. Mind a kísérleti, mind a szimulációból kapott értékek ezen határokon belül esnek, a transzverzális irányban épp az alsó határt éri a mért érték (részletesebb magyarázat később).

6.3.1.5 Képlékeny tulajdonságok

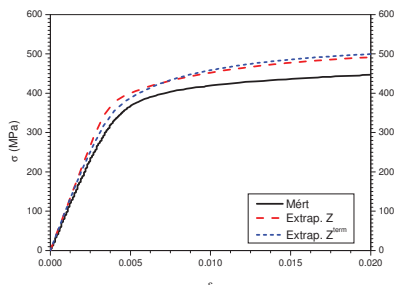
A feszültség–deformáció görbék részletesebb vizsgálatával a módszer képlékenységre vonatkozó jellemzőit állapíthatjuk meg. A különböző összenyomási irányokban a Young-modulusok extrapolálásakor bevezett módszert alkalmazhatjuk a feszültség–deformáció görbék extrapolálására is. Ehhez a numerikusan kapott görbéket interpolálni kell úgy, hogy az azonos deformációértékekhez tartozó feszültségértékeket egymáshoz tudjuk rendelni a különböző átlagolási ablakok esetén, majd ezekre a feszültségértékekre a 6.5a ábrán bemutatott módon logaritmikuskálán egyenest illetve az extrapolált feszültségértéket számíthatjuk ki. Az így kiszámított, pontonként extrapolált görbék (6.5b ábra) alapján megállapíthatjuk, hogy a sajtolási irányban történő terhelés következtében nagyobb feszültségértékeket eredményez, mint a transzverzális irányokban, miközben ez utóbbiak között gyakorlatilag nincs különbség. Ez azzal magyarázható, hogy a megnyúlt alakú részecskék nagy része a legnagyobb tengelyével a sajtolási irányban áll be, és ezért tapasztalható ebben az irányban jelentős folyásfeszültség-növekedés, miközben a transzverzális irányokban rendezetlenül orientáltan helyezkednek el, így ezek a folyásfeszültségek a transzverzális izotrópiának megfelelően közel egyenlők. Ezt mennyiségileg is jellemezve azt kapjuk, hogy a transzverzális irányokra (X és Y) vonatkozó görbék esetén a 2%-os deformációhoz tartozó feszültségértékekben (440,1 és 431,5 MPa) körülbelül 2%-os különbség adódik, így az extrapoláció képlékeny tulajdonságokra vonatkozó saját hibáját becsülhetjük ezzel az értékkel.

Az extrapolált görbék a rugalmas tartományban felülbecslik, a 0,5% fölötti alakításra pedig a longitudinális és transzverzális irányban kapott extrapolált görbék közrefogják a mért alakítási görbét. Tehát összességében elmondható, hogy a módszer felülbecsli a feszültségértékeket. Becsüljük meg, hogy ez a felülbecsülés milyen mértékű! Egyrészt, a rugalmas tulajdonságokat vizsgálva az extrapolált görbék kezdeti felfutása alapján leolvashatjuk az extrapolált Young-modulus értékeket a különböző irányokban, ezek $E_z = 104,5$ GPa, $E_x = 98$ GPa és $E_y = 97$ GPa, amelyeket a 6.5a ábrán nyilakkal jelölve meg is jelenítettünk. A

transzverzális irányokban ezek gyakorlatilag megegyeznek az extrapolációs egyenes által meghatározott értékekkel, míg a longitudinális irányban kb. 1%-kal magasabb annál. Ez a különbség abból ered, hogy a 6.5a ábrán feltüntetett Z irányhoz tartozó Young-modulusok nem követik szorosan az illesztett egyenes vonalát, így pontatlanabb extrapolált értékeket szolgáltatnak. Ez a szórás azzal magyarázható, hogy a Z irányban a szerkezeti korrelációs hossz nagyobb, mint a transzverzális irányokban, ezért az átlagolási ablak mérete nagyobb hatást gyakorol a Z irányú szerkezeti jellemzőkre (tulajdonképpen az átlagolt szerkezetben lévő „részecskék” effektív karcsúsága változik) és ezen keresztül a fizikai tulajdonságok statisztikus szórására. Megfigyelhető egyébként, hogy a három irány esetén ugyanazon tendencia szerint térnek el az illesztett egyenestől az értékek, de a Z irány esetén nagyobb az eltérés mértéke. Ezt elsősorban annak lehet tulajdonítani, hogy az egyes modellszerkezetek térfogati hányada nem egyenlő a modell konstrukciójából fakadóan. A Young-modulus esetén azonban igen jól közelítő feltételezés, hogy a térfogati hányad szűk intervallumban történő megváltozása esetén arányosnak tekinthető vele, ezáltal egy utólagos korrekciót hajthatunk végre a kapott értékeken. Mindhárom irány esetén elvégezve ezt, az extrapolált egyenes által szolgáltatott értékek mintegy 0,5 GPa-lal csökkentek. Ezt a kb. 0,5%-os hibát az átlagolási ablakok előállítási hibájának tekinthetjük. Másodrészt, ha most a képlékeny tulajdonságokra vonatkozó hatást ismét a 2%-os deformációnál kapott folyásfeszültséggel jellemezzük, akkor a 6.5b ábrán az extrapolált görbe kevesebb, mint 7%-kal nagyobb folyásfeszültséget ad a kísérleti görbéhez viszonyítva. Ha a trikvadratikus interpolációs polinomokat alkalmazó 21^3 és 25^3 nagyságú modelleket megvizsgáljuk, akkor a 2%-os deformációhoz tartozó folyásfeszültség-értékekben rendre 10% és 9%-os csökkenést figyelhetünk meg, amely tehát a végeelemmodellek numerikus megoldási hibájából ered, és a modellszerkezet igen durva közelítéssel való előállításával kapcsolatos. Valószínűsíthető, hogy az átlagolási ablak méretét csökkentve ez a hiba is csökken.

Ki kell térnünk azonban még a kezdeti termikus belső feszültségek szerepére is, amelyet a 6.1 fejezetben említettünk. Amikor az anyag a viszonylag hosszú idejű megeresztésen esik át, akkor a benne lévő feszültségek kiteperálódnak, majd a viszonylag gyors lehűtésekor a mátrix nagyobb hőtágulási együtthatója miatt a mátrixban eredő húzó-, míg a részecskékben nyomófeszültség alakul ki. Ez a kezdeti feszültségállapot azt eredményezi a kompozit alakítása során, hogy kismértékű összenyomáskor a mátrixban lévő eredő húzófeszültség először megszűnik, majd fokozatosan eredő nyomófeszültséggé alakul át az összenyomás irányában. (Természetesen ezekből a belső feszültségekből származó erőknek mindig egyensúlyt kell tartaniuk a külső erőkkel.) Ugyanakkor azt is megfigyelték, hogy a mátrixban maradnak lokálisan nagy nyomófeszültségek is, és összenyomáskor valószínűleg itt folyik meg először az anyag [13]. Mivel a fém hőtágulása lényegesen nagyobb, mint a kerámiáé, ezért a mátrix lokálisan képlékenyen is deformálódik a hűtés során, ami azt eredményezi, hogy az alakítási keményedés miatt helyenként nagyobb lokális folyásfeszültsége lesz a mátrixnak. Az elmondottakból

következik, hogy a rugalmas tulajdonságokra várhatóan nem, de a képlékeny tulajdonságokra hatással lesznek a termikus belső feszültségek.



6.6. ábra — Az extrapolált feszültség–deformáció görbe a sajtolás irányában a termikus belső feszültségek figyelembevételével (Z^{term}) és anélkül (Z). A mért görbét is feltüntetjük viszonyítás céljából.

A kezdeti termikus belső feszültségek hatásának tanulmányozásához a sajtolási irányban a kisebb térfogatú szimulációkat (16^3 , 25^3 , 32^3) megismételtük a hűtési szimulációkkal kiegészítve, majd az extrapolációs módszert ezekre az adatokra alkalmaztuk. Az összehasonlíthatóság kedvéért ugyanezekre a modellekre termikus belső feszültségek figyelembevétele nélkül is elvégeztük az extrapolációt, ezeket a görbéket mutatja a 6.6 ábra. A termikus belső feszültségeket figyelembe vevő modell esetén a Young-modulus kb. 0,5 GPa-lal kisebb, amely a modellezési hibán belül esik. A kezdeti rugalmas szakasz után viszont a mátrix képlékeny alakváltozása erőteljesebben megindul, ezáltal az alakítási görbe könyökrésze a kísérleti görbéhez hasonló módon elnyúltabbá válik, amit azzal magyarázhatunk, hogy a mátrixban nagy nyomófeszültség-koncentrációk jönnek létre a részecskék teteje és alja közelében a termikus belső feszültségek miatt [13]. Ezután az összességében nagyobb képlékeny alakváltozás miatti nagyobb alakítási keményedés következtében kb. 0,6%-os deformációtól kezdve kismértékben a termikus feszültség nélkül számított görbe fölé emelkedik, és innentől kezdve közelítőleg párhuzamosan haladnak, azaz a kezdeti állapot különbözősége már az alakítási keményedésben nem tapasztalható. A 2%-os deformációhoz tartozó folyásfeszültségekben kb. 1,5%-os különbség mutatkozik, ami kicsi a kísérleti görbe kb. 10%-kal alacsonyabb értékéhez képest.

6.3.1.6 A módszer alkalmazhatósága

Megállapítható, hogy egy reprezentatívnek tekinthető, a mikroszerkezeti korrelációk hosszaknál mintegy 9–10-szer nagyobb élhosszúságú kompozittérfogat ismeretében az általunk kidolgozott átlagolási ablak módszerrel gyakorlatilag jó becslést lehet adni a kompozit rugalmas és képlékeny viselkedésére. Ezzel a módszerrel megoldást adtunk arra a problémára, hogy elegendően nagy térfogatú anyag nem modellezhető közvetlenül vége-selemmódszerrel.

Mind a képlékeny, mind a rugalmas tulajdonságok vizsgálatánál azt láttuk, hogy a szerkezetben megfigyelhető transzverzális izotrópia a mechanikai tulajdonságokban is megjelenik.

Ez egyben alkalmat adott arra, hogy a szimulációs eredményekben rejlő hibákat szétválasszuk, és külön-külön meghatározzuk. Mivel a módszerből kapott Young-modulusok 1%-os, és a feszültség–deformáció görbék 2%-os határon belüli egyezést mutattak a transzverzális irányokban, kijelenthetjük, hogy a módszer extrapolációból származó hibája rugalmas esetben kb. 1%-ra, képlékeny esetben 2%-ra tehető. Ez azt jelenti, hogy az eredmények további hibája abból a feltételezésből ered, hogy a trilineáris interpolációs függvényeket alkalmazó végelemek kellően pontosan adják meg a feszültséget és a deformációt. Ez annak ismeretében, hogy a Young-modulusbeli különbség a mátrix és a kerámiareszecske között nagy, kb. 5-szörös, a kis cellaszámú modellek esetén nem realiztikus feltételezés. Trikvdratikus interpolációs függvényekkel való közelítéssel jobb eredmények kaphatók, azonban a számítási költségek jelentősen megnövekednek. Mivel a lineáris anyagi választ jellemző Young-modulus esetén a módszer teljes hibája 4%, míg a nemlineáris választ a 2%-os deformációhoz tartozó folyásfeszültség-értékek viszonyával jellemezve a teljes hiba 7% volt, az interpolációs függvények pontatlanságából eredő hiba rugalmas tulajdonságokra 3%, míg képlékeny tulajdonságokra 5%-ra tehető. Ezek a hibák a valódi anyag Young-modulusához, illetve folyásfeszültségéhez képest mindig nagyobb értéket eredményeznek. A termikus belső feszültségek figyelembevétele a modellezés során az alakítási görbe könyökrészére van hatással, és realiztikusabb függvénymentet eredményez.

6.3.2 Egységcellamodellek [S2], [S3]

6.3.2.1 A módszer elve

Az egyrészesecskes egységcellamodellek azért váltak elfogadott módszerré, mivel más közvetlen modellezési technikák során felmerülő hátrányos tulajdonságokat próbálták kiküszöbölni bevezetésükkel. Itt elsősorban a részletes szerkezet ismeretében felépített nagyméretű modellek néha kivitelezhetetlen számítási igénye, illetve a kivitelezhető végelemodellek hálójának elégtelen geometriai felbontása adta az okot, hogy egy gyorsabb, a szerkezet statisztikus viszonyaira épülő, gyakorlati szempontból használható pontosságú módszert dolgozzanak ki. A módszert szokás még önkonzisztens vagy átlagtér modellnek is nevezni.

A klasszikus egységcellamodell lényege, hogy egy olyan ekvivalens modell épüljön fel, amelyben egyetlen részecske helyezkedik el beágyazva a mátrix közepébe, és mechanikai szempontból úgy viselkedik, mint a kompozit egy makroszkopikus darabja. Esetünkben másképpen fogalmazva: egy átlagosnak tekinthető részecskét helyezünk bele egy átlagosnak tekinthető mátrixba, és erről a modellről azt feltételezzük, hogy átlagosan fog viselkedni. Kontinuummodellben gondolkodva ezen modell eredményeinek skálafüggetlennek kell lennie, így a modell fő geometriai paraméterei csak arányok lehetnek.

Ismét adódik a lehetőség, hogy kihasználjuk azt, hogy a kompozit egy geometriailag reprezentatívnek tekinthető darabjáról valódi háromdimenziós információink vannak. Ezzel

lehetőségünk nyílik leellenőrizni azt a feltételezést, hogy valódi szerkezet adataiból kapott információk alapján egy ilyen modellt felépítve valóban átlagosan fog-e viselkedni a modell, azaz a kísérleti görbékhez közeli eredményeket szolgáltat-e, továbbá ha az elvárásaink nem teljesülnek, akkor miképpen javítható a modell, elsősorban további szerkezeti információk figyelembevételével.

Következésképpen e modellek felépítésénél a részecske méreteinek arányát az 5.2.1 fejezetben ismertetett szerkezetanalízis alapján nyilvánvalóan az átlagos karcsúságadatok adhatják. Azonban a nehezebb kérdés az, hogy milyenek legyenek a méretei az egységcellának, azaz az átlagos mátrixkörnyezetnek. Közelítsük úgy a problémát, hogy a kompozit kemény kerámia-részecskéi elsősorban az őket szorosan körülvevő viszonylag lágy mátrixszal hatnak kölcsön, minden más kölcsönhatás, kompoziton keresztüli erőátvitel már csak egy átlagtérrel veendő figyelembe, amely kisebb hatású, mint ez a közvetlen kölcsönhatás. Tehát a lehető legjobban járunk el, ha az 5.2.4 fejezetben ismertetett lokális térfogatok statisztikájával közelítjük az átlagos mátrix méreteit, azaz a lokális térfogatok átlagos karcsúságát tekintjük mérvadónak. Természetesen az egységcellára és a részecskére vonatkozó méretarányok egymástól független geometriai elemeket határoznak meg, tehát kell még egy paraméter, ami ezek méretét egymáshoz képest szabályozza. Ez a mennyiség az átlagos térfogati hányad, amelyet rögzítünk az átlagos cellára. Már csak az átlagos részecske alakját kell meghatározni. Szokásos, jól működő közelítés szokott lenni téglalap alakú részecske feltételezése kétdimenziós modellek esetén, és a határfeltételek könnyű meghatározását teszi lehetővé a téglalap alakú egységcella is [13]. Első közelítésben mi is ezt terjesztjük ki három dimenzióra. Figyelembe véve azonban az alakfaktorok (5.2.3 fejezet) szimulációból kapott értékeit, az ellipszoid alak látszik jobb közelítésnek.

6.3.2.2 A módszer javításai

Az imént vázolt modell azonban csak igen durva közelítésben tartalmaz információt a részecskék térbeli elhelyezkedéséről, különös tekintettel a részecskecsoportosulásokra. Általában véve a részecskék eloszlása nem egyenletes, és így az egyes részecskék különböző környezettel rendelkeznek, amelyet a lokális térfogati hányad is jelez. Tekintettel arra, hogy az LTTH eloszlásának vizsgálatánál (5.6b ábra) láthattuk, hogy az eloszlás igen széles (kb. 2–40%), az egyrészecskemodellbe implicite beleértett, átlagosan egyenletes részecskeeloszlás feltételezése kis valószínűséggel közelíti önmagában jól a valódi anyagot. A modell javításához érdemes nem csak egyféle átlagos egyrészecskemodellt felépíteni, hanem lefedve az LTTH eloszlását, a különböző részecskekörnyezeteknek megfelelő különböző térfogati hányadú modellek eredményeinek felhasználásával, a térfogati reprezentáltságuknak megfelelően összegezni a modelleredményeket.

Az 5.2.2 fejezet alapján gyanítható, hogy a részecskék nagytengegyének a külső terhelés irányával bezárt szöge is fontos szerkezeti információ lehet az egységcellamodellek szempontjából. Tehát további javításként a részecskeorientáció-eloszlást is figyelembe lehet venni.

Az eddigi egységcellamodellek esetében feltételeztük, hogy a részecske az átlagos környezetének közepén helyezkedik el. Azonban az 5.2.4.4 alfejezetben említett lokális térfogaton belüli excentricitás eloszlása azt mutatja, hogy például részecskecsoporthasulások következtében a részecske kissé eltolódik a lokális térfogat szélé felé. Ha a modellben számításba vesszük ezt a szerkezeti információt is, akkor a részecskék egymáshoz viszonyított elhelyezkedésének figyelembe vételét statisztikai értelemben tovább finomítottuk, és így várhatóan tovább javul a modell.

6.3.2.3 A modellek megvalósítása

Az egységcellamodelleket tehát arányszámok ismeretében kell előállítanunk. Tekintve, hogy adott a részecskék féltengelyeire vonatkozó $a_3 : a_1$ és $a_2 : a_1$, valamint a cella méretére vonatkozó $A_3 : A_1$ és $A_2 : A_1$ arány, továbbá az f_V térfogati hányad, ekkor a hasáb alakú részecskére vonatkozó

$$(211) \quad f_V = \frac{2a_1 \cdot 2a_2 \cdot 2a_3}{2A_1 \cdot 2A_2 \cdot 2A_3}$$

összefüggés értelmében, a modell valamelyik oldalhosszát egységnyinek választva (például $A_1 = 1$)

$$(212) \quad a_1 = A_1 \cdot \sqrt[3]{f_V \frac{A_2/A_1 \cdot A_3/A_1}{a_2/a_1 \cdot a_3/a_1}}$$

meghatározható, és ebből az arányok ismeretében az összes többi méret is. Ugyanezt végigkövetve ellipszoid alakú részecskére (211) az

$$(213) \quad f_V = \frac{4}{3} \pi \cdot a_1 \cdot a_2 \cdot a_3 / (2A_1 \cdot 2A_2 \cdot 2A_3)$$

alakot veszi fel, amiből az

$$(214) \quad a_1 = A_1 \cdot \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} f_V \frac{A_2/A_1 \cdot A_3/A_1}{a_2/a_1 \cdot a_3/a_1}}$$

adódik. Mivel a részecske nem érhet túl az öt körbevevő mátrixon, ebből felső korlát adódik a térfogati hányadra nézve, amelyet kiszámolva hasáb alakú részecske esetén (211) alapján

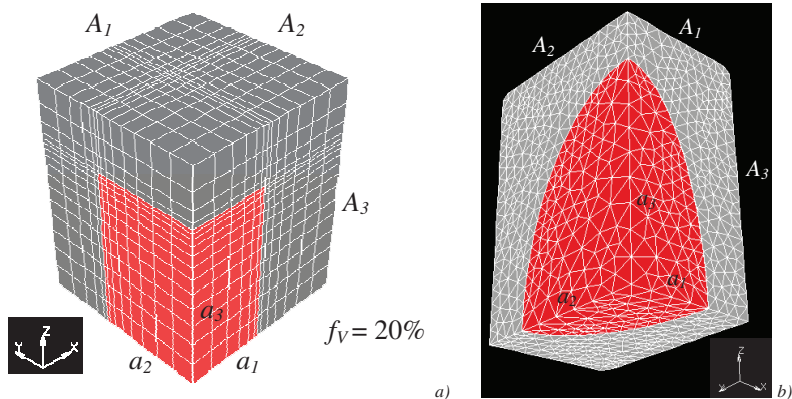
$$(215) \quad f_V^{hasáb} = \min \left\{ \frac{a_1 \cdot a_2}{A_1 \cdot A_2}, \frac{a_1 \cdot a_3}{A_1 \cdot A_3}, \frac{a_2 \cdot a_3}{A_2 \cdot A_3} \right\},$$

illetve ellipszoid alakú részecske esetén (213) alapján

$$(216) \quad f_V^{ell} \leq \frac{\pi}{6} \min \left\{ \frac{a_1 \cdot a_2}{A_1 \cdot A_2}, \frac{a_1 \cdot a_3}{A_1 \cdot A_3}, \frac{a_2 \cdot a_3}{A_2 \cdot A_3} \right\}$$

adódik. A szerkezetanalízis konkrét adatai szerint $f_V^{hasáb} = 0,72$, valamint $f_V^{ell} = 0,38$, ennél nagyobb térfogati hányadú modelleket a geometriai megszorítások miatt nem tudunk kezelni, és valószínűleg e korlát közelében a modell pontossága is romlik. Látható, hogy az ellipszoid alakú részecske modelljével gond lehet nagy térfogati hányad esetén, ezért az eloszlásgörbe alapján csak a 4%, 8%, 12%, 16%, 20%, 24%, 28%, 32% és 36% térfogati hányadú modelleket építettük fel, míg a hasábalakú modelleknél a 40%-os modellt is kiszámíthattuk. A 20%-os modellek láthatók a 6.7 ábrán.

A modellek szimmetriája miatt elegendő a nyolcadukat modellezni, ezzel csökkenthető a futási idő, illetve növelhető a modell térbeli felbontása. Ennek következtében a határfeltételeket is ennek megfelelően választottuk meg, azaz a szimmetriások mentén tükörhatárral, míg a modell oldalsó felületei a szokásos kinematikus határfeltétellel voltak meghatározva. A modellek felső, Z-re merőleges síkja a keresztfej-elmozduláshoz volt rögzítve. A mátrix-részecske határfelületen várhatóan nagy feszültséggradiens léphet fel, ezért érdemes a felület felé kicsit sűrűbb hálót generálni, mint a homogén területeken a gyorsabb és pontosabb számítás kedvéért. Ezt több kísérlet után állítottuk be, amely különösen a hasáb alakú részecske esetén okozott jelentős javulást, hiszen az élek mentén mindig nagy a feszültségkoncentráció. Az ellipszoid alakú részecskék esetén ez a probléma lényegében nem játszott szerepet. A modelleket mind a termikus belső feszültségek szimulációjával, mind kezdeti belső feszültség nélkül előállítottuk.



6.7. ábra — Az egyrészecskés egységcellamodellek megvalósítása a) hasáb és b) ellipszoid alakú részecskével. Az egységcella nyolcada látható. A pirosan jelzett végelemek a kerámiafázist, míg a szürkén színezett végelemek a mátrixot jelölik. Mindkét esetben 20%-os térfogati hányadú modellt ábrázoltunk.

6.3.2.4 A modellek összegzése

Az egyes egységcellamodellek eredményeként egy feszültség–deformáció görbét várunk. E függetlenül kiszámított modellek összegzését a térfogati reprezentáltságuk alapján hajtjuk végre. Erre azonban két lehetőség is kínálkozik. Az egyik a Reuss-féle értelemben vett soros, a másik a

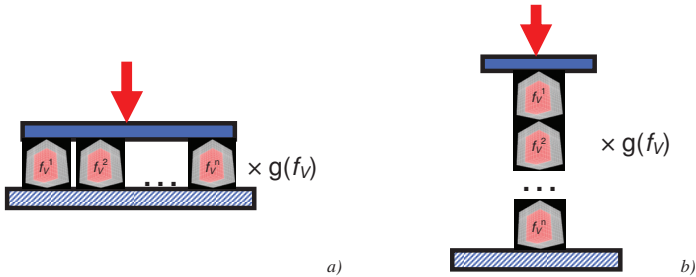
Voigt-féle párhuzamos modell-összekapcsolás. A 2.3.1 fejezetben leírt gondolatmenethez hasonlóan a különböző f_V^i térfogati hányadú egyéjcellamodellekre kapott $\sigma(\varepsilon, f_V^i)$ feszültség–deformáció görbéket a

$$(217) \quad \sigma_{\text{eff}}(\varepsilon) = \langle \sigma(\varepsilon, f_V) \rangle_{f_V} \equiv \int \sigma(\varepsilon, f_V) g(f_V) df_V \approx \sum_i \sigma(\varepsilon, f_V^i) w(f_V^i)$$

összefüggésbe helyettesítve az effektív feszültség–deformáció görbe Voigt-féle értelemben megkapható, ahol $g(f_V)$ az f_V térfogati hányadú modell térfogati előfordulási valószínűsége, $w(f_V^i)$ pedig diszkrét felosztásban az f_V^i térfogati hányadú modellhez tartozó súlyfaktor. Ezt szemlélteti a 6.8a ábra. Ugyanígy a soros összekapcsoláshoz szükséges $\varepsilon(\sigma, f_V^i)$ függvényekből az

$$(218) \quad \varepsilon_{\text{eff}}(\sigma) = \langle \varepsilon(\sigma, f_V) \rangle_{f_V} = \int \varepsilon(\sigma, f_V) g(f_V) df_V \approx \sum_i \varepsilon(\sigma, f_V^i) w(f_V^i)$$

összefüggés alapján a Reuss-féle (6.8b ábra) átlagolt deformáció–feszültség görbét kapjuk, amely invertálás után megadja az effektív görbét.



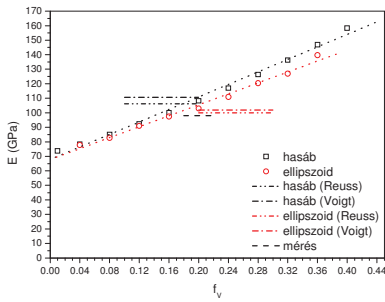
6.8. ábra — a) A párhuzamos (Voigt) és b) soros (Reuss) modell-összekapcsolás. A nyilak jelzik a terhelés irányját.

6.3.2.5 Rugalmas tulajdonságok

A különböző térfogati hányadú egységcellamodellekből adódó Young-modulusokat a 6.9a ábrán ábrázoltuk. Feltüntetettük továbbá a (217) szerinti Voigt-féle és a (218) szerinti Reuss-féle átlagolt értékeket is, amelyek a névleges 20%-os térfogati hányadhoz tartoznak, ezeket a fontosabb értékeket pedig a 6.9b ábra táblázatában közöltük. Szembeötlő, hogy a hasáb alakú részecskékkel működő modell a neki megfelelő ellipszoidmodellhez képest annál nagyobb Young-modulus értékeket ad, minél nagyobb a részecske térfogati hányada. És értelemszerűen az átlagolt értékekre is öröklődik ez a hatás, így nemcsak nagyobb Young-modulust jósol, hanem a határok is tágabbak a hasáb alakú részecskék esetén. Tehát a részecskealak hatása már a rugalmas alakváltozásban is érzékelhető. Összhangban az elvárásainkkal az ellipszoid alakú részecskék jobb egyezést mutatnak a kísérlettel. Az ellipszoid alakú részecskék esetén a termikus belső feszültségeket figyelembe vevő modellek eredményét rajzoltuk fel, azonban — az elvárásnak

megfelelően — nem volt számottevő különbség a termikus feszültségek nélküli modellekhez képest.

A módszer pontosságát becsülhetjük azzal, hogy a kétféle átlagolás eredményének a középértékét hasonlítjuk a mért Young-modulus értékhez. Ekkor a hasáb, illetve ellipszoid alakú részecskéket tartalmazó modellek esetén 11%, illetve 3% adódik a módszer hibájaként. A névleges térfogati hányaddal rendelkező egyrészecskés modellek hasáb, illetve ellipszoid részecskék esetén 10%-os, illetve 5%-os hibát hordoznak. A hibák mindig pozitív irányban értendők, hiszen ezek a modellek is várhatóan mindig felülbecslik a valódi értéket. Tehát az eloszlásfüggvény alapján átlagolt modellek ellipszoid alakú részecskék esetén közelebbi becsléseket adtak, mint az egyszerű egyrészecskés modell.



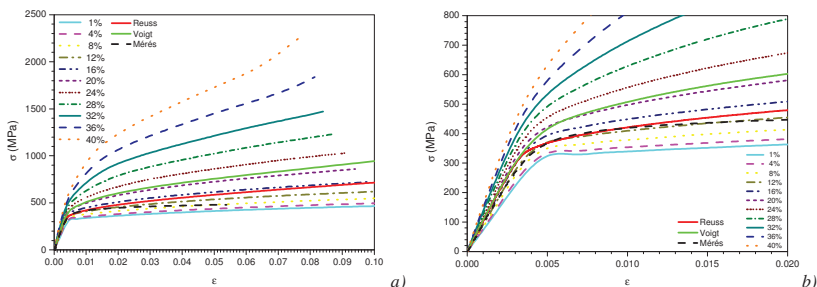
Modell	Young-modulus (GPa)	
	Reuss	Voigt
Hasáb	106	111
Ellipszoid	100	102
Hasáb 20%	108	
Ellipszoid 20%	103	
Mérés	98	

6.9. ábra — a) A különböző térfogati hányadú (f_v) egységcellamodellek Young-modulusai (E) hasáb és ellipszoid alakú részecskék esetén. A súlyok szerinti Reuss- és Voigt-féle átlagolással kapott Young-modulusokat is feltüntettük. b) Táblázat a kapott Young-modulusok fontosabb numerikus értékeiről

6.3.2.6 Képlékeny tulajdonságok

A különböző térfogati hányadú végelemodellek Z irányú egytengelyű összenyomás során szolgáltatott feszültség–deformáció görbéi láthatók a 6.10a ábrán hasáb alakú részecskék esetén. Az alakítás felső határának ekkor különösen nagyok kell lennie ahhoz, hogy ezekből a modellekből a (218) szerinti átlagolást végrehajthassuk, ezért minden modellt 10%-os mérnöki deformációig számítottunk ki. (A grafikonokon természetesen mindig a valódi feszültséget és deformációt ábráztunk.) Látható, hogy a 32%-nál nagyobb térfogati hányadú modellek másképpen viselkednek, mint a többi. Ez a részecske fölötti egyre vékonyabb mátrixrétegnek köszönhető, ugyanis a kerámiarészecske tulajdonságai egyre hangsúlyosabban jelennek meg. Az ezekhez tartozó görbék már jóval kisebb valódi deformációknál befejeződnek, mivel nagy a mátrix oldalirányú méretnövekedése a mátrix nagymértékű képlékeny alakításából fakadóan. Várhatóan a Voigt-féle átlagolásnál ezek a modellek jelentősen megemelhetik az effektív görbék nagyobb deformációhoz tartozó szakaszát. Tehát a párhuzamosan átlagolt modelleket csak a kisebb deformációk esetén vehetjük mérvadónak, míg a soros átlagolásnál ez a hatás nem fog számítani, mivel a nagy térfogati hányadú modellek kis mértékben fognak deformálódni.

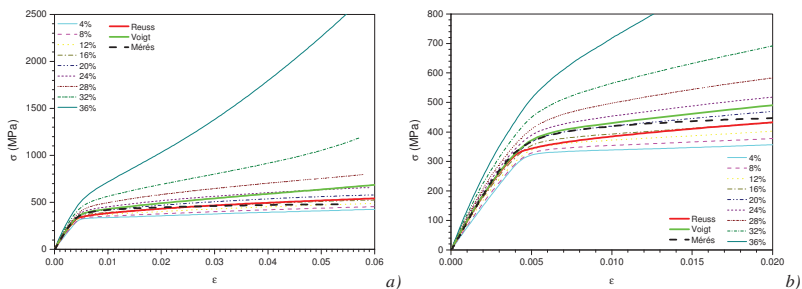
A jobb láthatóság kedvéért a 6.10b ábrán a görbék releváns részét ábrázoltuk. Az alapelvárások szerint a 20%-os térfogati hányadú modellnek kellene a mért görbét közelítenie, azonban a 12%-hoz tartozó görbe fut legközelebb hozzá. A 20%-os modell körülbelül 30%-kal túlbecsüli a feszültséget, amely főként az éles sarkoknál és éléknél fellépő feszültségkoncentráció, valamint a deformáció irányára merőlegesen álló sík lapok miatt történik. Így azt állapíthatjuk meg, hogy ez a fajta egységcellás megközelítés nagyon durva közelítést ad. Az LTTH eloszlásfüggvényét felhasználó, javított modellt megvizsgálva látható, hogy a Voigt- és a Reuss-féle átlaggörbék sem fogják közre a mért görbét. Ezekből az eredményekből kiindulva a későbbiekben a hasábrészecskés modellt nem tekintjük jól közelítő modellnek.



6.10. ábra — A különböző térfogati hányadú egységcellamodellek nyomófeszültség–deformáció görbéi hasáb alakú részecskék esetén. a) A teljes, számított görbék, b) a lényeges rész kinagyítva. Felüntetjük a Reuss- és Voigt-féle átlagolt görbéket, továbbá a kísérleti görbét is.

Most vizsgáljuk meg, hogy az alak szerint jobban közelítő modellek, amelyek már a rugalmas tulajdonságokban eredményesebbek voltak, a képlékeny tulajdonságok tekintetében is jobban működnek-e! A különböző térfogati hányadú, ellipszoid alakú részecskéket tartalmazó modellek alakítási görbéjét a 6.11a ábra mutatja. A hasábalakú részecskékre elmondottak itt is igazak lesznek, de a görbék most kevésbé távolodnak el egymástól és a kísérleti görbétől. A 6.10b ábrán kinagyítva a releváns deformációtartományt, látható, hogy a 20%-os modellgörbe 1,2%-os deformációértéktől szinte együtt halad a mérési görbével, csak ezután tér el tőle nagyobb alakítási keményedést mutatva, azaz kezdeti szakasza kiváló egyezést mutat a kísérlettel. Ez annak a fizikai hatásnak tulajdonítható, hogy az egységcellában kialakuló feszültségtér eddig a deformációig nem kerül kölcsönhatásba olyan mértékben a környezetével, hogy az átlagtérnél pontosabb közelítésre lenne szükség az anyag viselkedésének leírásakor. Ez a kompozitra nézve azt jelenti, hogy eddig a deformációig a szomszédos lokális térfogatok nem befolyásolják lényegesen egymás deformációs terét.

Az átlagolt görbékről most már elmondható, hogy közrefogják a kísérleti görbét, és leolvasható, hogy a Voigt-féle átlagolás ad jobban közelítő eredményt. A termikus feszültségek figyelembevétele ezeknél a modelleknél is a feszültség–deformáció görbék kezdeti szakaszát módosította kis mértékben (az eredmények a 6.13b ábrán láthatók, részletesebben ott, a 6.3.3.4 alfejezetben tárgyaljuk).



6.11. ábra — A különböző térfogati hányadú egységcellamodellek nyomófeszültség-deformáció görbéi ellipszoid alakú részecskék esetén a termikus belső feszültségeket figyelembe véve. a) A teljes modellgörbék, b) a lényeges rész kinagyítva. Feltüntetjük a Reuss- és Voigt-féle átlagolt görbéket, továbbá a kísérleti görbét is

6.3.2.7 A módszer alkalmazhatósága

Összefoglalásképpen megállapíthatjuk, hogy a részecskék alakja sokat számít a szimulációk eredményében. A részecskék alakja nem egyszerűsíthető le durván, mivel csak a méretinformációkat figyelembe véve a modellek megvalósításánál durva közelítésre számíthatunk. Ha azonban az alakfaktor szerint jobban közelítő részecskealakokkal számolunk, akkor már kiváló eredményeket kapunk, amely azt is jelzi, hogy a szerkezeti mérés felbontása és pontossága elegendő volt a kitűzött modellezési cél megvalósításához. Az egyszerű egyrészecskés ellipszoidmodell 1,2%-os deformációig nagyon közel halad a mérthez, az eltérés 0,6% alatt marad, utána viszont már nagyobb alakítási keményedést mutat, mint a kísérleti görbe. Az átlagolt görbék pedig viszonylag tág alsó és felső határokat adtak: 1,2%-os deformációnál 11%-os az eltérésük a folyásfeszültségben. Ez gyakorlati szempontból fontos eredmény, de a kompozit effektív viselkedését illetően nem kielégítő, mivel ezen túlmenően — ismét az alakítási keményedés túlbecslése miatt — 2,5%-os deformáció felett már a mérési görbe kívül esik a határokon. Azonban felmerül a kérdés: vajon nem lehetne-e ennél realiztikusabb átlagolást alkalmazni a kompozit ismert, belső heterogenitásából fakadó valódi szerkezete alapján, hogy a képlékeny deformációt hosszabb tartományban leíró eredményt kapjunk. Egy lehetséges megoldást vázolunk fel a 6.3.3 alfejezetben.

Fontos kiemelni, hogy a módszer alapjául szolgáló, 5.2.4 alfejezet szerint képzett lokális térfogatok feltérképezéséhez mindenképpen a háromdimenziós szerkezet ismeretére van szükség. Az egyébként gyakran szokásos kétdimenziós véletlen metszetek vizsgálatával nem rekonstruálhatóak ezek a lokális térfogatok, így nem nyerhető a lokális környezetre vonatkozó releváns információ belőlük. Az eredmények tükrében az is látható, hogy ezen információk következetes felhasználásával igen jól közelítő egységcellamodell építhető kontinuummechanikai *ab initio* módszerekkel, tehát szabad illesztési paraméter felhasználása nélkül.

6.3.3 Multiskálamodellek [S2], [S3]

6.3.3.1 A módszer elve

A most tárgyalandó multiskálamodellek szorosan kapcsolódnak a 6.3.2 fejezetben leírt egységcellamodellekhez. Az egységcellamodellek által szolgáltatott eredmények soros, illetve párhuzamos értelemben vett, mikroszerkezeti eloszláson alapuló átlagai nem adtak az elvárásoknak megfelelő, jól közelítő eredményt a kompozit effektív viselkedésére, hanem csak egy viszonylag tág alsó és felső korlátot kaptunk a feszültség–deformáció görbékre. Viszont a 20%-os modell, az egyszerűségéhez képest egészen kiváló illeszkedésű eredményt adott, tehát magát az egységcellamodelleket nem kell elvetni, hanem érdemes lenne olyan átlagolási módszert kidolgozni, amely valóban jól közelítő eredményt ad.

A korábbi átlagolások esetén az egyes modellek közötti kölcsönhatást mesterségesen — egyenlő deformációk, illetve egyenlő feszültségek előírásával — vettük figyelembe, és ez azzal az előnnyel járt, hogy elméletileg számítható volt az effektív görbe alsó és felső határa. Következésképpen most az egyes modellek közötti kapcsolatot megpróbáljuk reálisabban, de a modell egyszerűségét továbbra is fenntartva megteremteni. Ezért a különböző térfogati hányadú egységcellamodelleket összekapcsoljuk egymással egy újabb végelelemmodellben, és e modell feszültség–deformáció görbéje szolgáltatja a kompozit makroszkopikus tulajdonságait leíró görbéket. Ebben az elképzelésben tehát az egységcellamodellek mintegy a lokális térfogatoknak felelnek meg, amelyek egy makroszkopikus kompozittérfogatba vannak beágyazva. Ezen mikroszerkezeti alapú átlagos modellekből felépíthetünk egy magasabb hierarchiaszintű, nagyobb skálájú makroszkopikus modellt, innen ered a módszer elnevezése is, amelyet az angol elnevezés alapján gyakran MMM^{*}-nek rövidítünk. Egy ilyen multiskálamodellben mind a feszültség, mind a deformációs tér folytonossága biztosított, tehát mindenképpen a sorosan és párhuzamosan átlagolt modellek közötti eredményt fog adni.

A modell egyszerűségét megtartandó, a valódi szerkezet topológiai megszorításait leegyszerűsítettük, és kocka alakú végelelemekből felépített szintén kocka alakú makroszkopikus modellt alkalmaztunk. Természetesen az egyes mikroszerkezeti modelleket például az 5.6b ábrán látható eloszlásfüggvény szerinti reprezentativitásban kell szerepeltetni a makroszkopikus modellben, ha az egyetlen változó paraméter a térfogati hányad. Azonban a térbeli elrendeződésüket nehéz lenne ilyen geometriai viszonyok mellett megfeleltetni a valódi szerkezetnek, ezért véletlenszerűen helyezük el ezeket a modellben (ebből eredően véletlenszerűen csatolt modellnek is nevezzük). Megjegyezzük, hogy ez a modell filozófiájában közel van a 6.3.1 alfejezetben ismertetett átlagolásiablak-módszerhez, amely szintén a szerkezeti részletek egy magasabb skálán (a cellák szintjén) történő elmosásával, átlagolásával egyszerűsítette a modellt, azonban ott az átlagolt cellák térbeli elrendeződést impliciten figyelembe

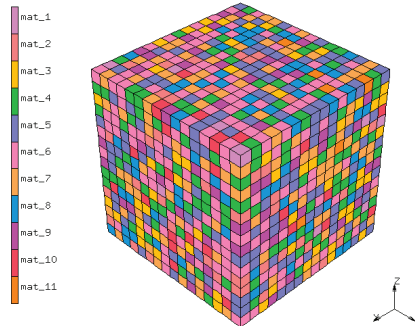
^{*} Multiscale Modelling Methods

vettük, miközben az átlagolás volt erősen közelítő jellegű. Az MMM modellekben az egyes alacsonyabb skálájú modellek pontosabbak, viszont a térbeli elrendezésben kell erősebb közelítéssel élnünk.

6.3.3.2 A modellek megvalósítása

A modell elvi felépítése alapján azonnal következik a végelelemmodell létrehozásának menete is. Kocka alakú modellterefogatot felosztottunk egyenletes hálóval L^3 számú téglalatest alakú végeselemre. Minden egyes végeselemhez egy-egy mikroszerkezeti modellnek megfelelő anyagi jellemzőt rendeltünk, amellyel a szimuláció során a mechanikai viselkedését modellezzük, ez látható a 6.12. ábrán. Ezek az adatok az egységcellamodellek effektív Young-modulusa (E_{eff}), Poisson-száma, térfogati hányada, és folyásfeszültség–deformáció görbéjük ($\sigma_f(\varepsilon_p)$) volt. Ez utóbbi görbét a (11) és a (39) egyenlet alapján az egyes modellek $\sigma(\varepsilon)$ feszültség–deformáció görbéjéből határoztuk meg:

$$(219) \quad \sigma(\varepsilon) = \sigma(\varepsilon_e + \varepsilon_p) = \sigma(\sigma(\varepsilon)/E_{eff} + \varepsilon_p) \equiv \sigma_f(\varepsilon_p) = \sigma(\sigma_f(\varepsilon_p)/E_{eff} + \varepsilon_p).$$



6.12. ábra — A multiskála modell egyik lehetséges megvalósítása. Itt 16^3 végeselemet használtunk. Színekkel különböztettük meg a különböző anyagi tulajdonságokat (mat_n), amelyek növekvő számozásával az egyre nagyobb térfogati hányadú modelleket jelölik az eloszlásfüggvénynek megfelelő reprezentativitásban.

Mivel a modellben a különböző anyagi tulajdonságú végeselemek véletlenszerűen kerülnek egymás mellé, ezért az elemek torzulását pontosabban leíró végeselemeket választottunk, azaz a 3.1b ábrán látható trikvadratikus interpolációt alkalmazó végeselemeket használtuk. Továbbá, mivel a modell méretét immáron nem határozza meg semmilyen anyagszerkezeti összefüggés, az tetszőleges is lehetne. Technikai felső korlátot jelent azonban az elfogadható idő alatt történő kiszámíthatóság, elvi alsó korlátot határoz meg a modellek pontossága. Ezekről a modellektől elvárható, hogy bizonyos méret fölött ergodikusan viselkedjenek, tehát különböző véletlenszerűen megvalósított modellek esetén az eredmények átlagának a végtelen térfogatra vonatkozó eredményt kell adnia, azaz ha az eredmények szórása kicsi, akkor az átlaghoz közeli eredményeket fogunk kapni. A végelelemmodellekből adódó eredmények szórásának csökkenése

a modellméret növelése során pedig elsősorban a peremfeltételekre való érzékenységgel kapcsolatos [47]. A modellek méretét tehát addig növeltük, amíg ez a szórás elfogadhatóan kicsi lett, így az $L=16$ méret esetén a modell 10 különböző megvalósításából kapott feszültségek 0,1%-os hibán belül egyenlők voltak, így ezt már jó közelítésnek ítéltük.

A multiskálamodelleket az eddigi vizsgálatoknak megfelelően Z irányú összenyomási deformációnak vetettük alá. Az oldalsó felületeken a végtelen anyagba való beágyazottság feltételezése szerinti kinematikus határfeltételeket írtunk elő, az alsó lapon tükörhatár, míg a felső sík a mozgó keresztfejhez volt rögzítve.

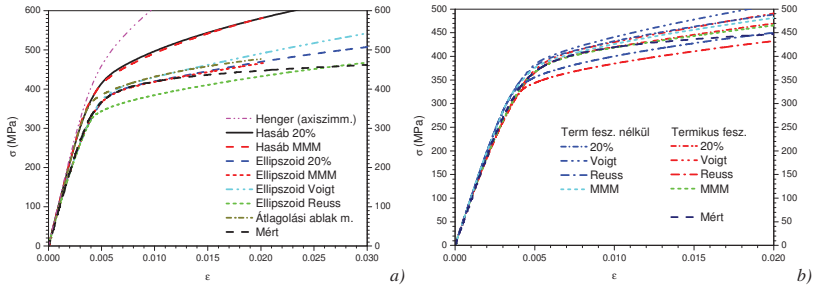
6.3.3.3 Rugalmas tulajdonságok

A hasáb alakú részecskéket tartalmazó egyrészecskés modellekre elvégezve a multiskálás szimulációkat a soros és párhuzamos csatolású modellek által képzett határokon belül eső 108 GPa-t kapunk a Young-modulus értékére. Ugyanerre az ellipszoidmodellek esetén 102 GPa-t kapunk mind a termikus belső feszültségek figyelembevételével, mind az anélkül számított modellek esetén, amely eléri a párhuzamos csatolású modell által szolgáltatott felső határt. Megállapítható, hogy a Young modulus értéke korábbi elvárásainktól eltérően mindig erős túlbecslést mutat akár az egyszerű egyrészecskés modellt, akár az átlagolt értékeket, akár pedig a multiskálás megközelítést nézzük. Ezt azzal magyarázhatjuk, hogy ezekben a modellszerkezetekben mindenhol azt feltételeztük, hogy a megnyúlt részecskék legnagyobb tengelyükkel a külső terhelés irányába esnek, és ezzel erősebb átlagos anizotrópiát hoztunk létre a modellben, mint a kompozit átlagos anizotrópiája. Tehát a modell egy későbbi javításában ezt a hatást a valódi részecskék orientációjának figyelembevételével ellensúlyoznunk kell (lásd 6.3.3.5 alfejezet). Fontos megállapítani továbbá, hogy a Young-modulus értékét a részecskéalak is jelentősen befolyásolja, nem csak a térfogati hányad függvénye. Ennek a felismerésnek közvetlen következménye, hogy a modellszerkezetek létrehozásakor ügyelni kell az alakot túlzottan leegyszerűsítő modellekre.

6.3.3.4 Képlékeny tulajdonságok

A multiskála modellekből kapott feszültség–deformáció görbéket a 6.13a ábra szemlélteti. Mind a hasáb, mind az ellipszoid alakú részecskéket tartalmazó modellek esetén szembetűnő, hogy az egyrészecskés modellek és a multiskálás modellek eredménye alig különbözik egymástól, mindkét esetben a multiskálás eredmény valamivel kisebb folyásfeszültséget ad. Ez a viselkedés az LTH eloszlásfüggvényével (5.6b ábra) kapcsolatos, ugyanis ez közelítőleg Gauss-függvényt követ, és a várható értéke a névleges térfogati hányadnál van. Mint ismeretes az egyensúlyi rendszerekben a fizikai mennyiségek fluktuációját normális eloszlás írja le. A kompozit keveréses öntéssel történő előállítási folyamatával a folyékony alumíniumba kevert kerámiarészecskék szuszpenziójának egy fagyott állapotát állítják elő, amelyet általánosságban nemegyensúlyi

állapotnak tekintünk, ezt követi még a melegsajtolási eljárás. Az általunk vizsgált $243^3 \mu\text{m}^3$ -es rekonstruált térfogatot azonban — az LTH Gauss-eloszlása miatt — lokálisan az egyensúlyhoz közeli állapotnak tekinthetjük. Ugyanerre a következtetésre jutottak korábban a kísérletileg [23], valamint az egyensúlyi merevgömb-rendszeren elméletileg [24] meghatározott exponenciálisan lecsengő egyenűthossz-függvény egyezése alapján. (Megjegyezzük, hogy azért kisebb mindkét részecskealak esetén a multiskálás modell által adott feszültség, mert a súlyfaktorok szerint előállított átlagos térfogati hányaduk numerikus okokból valamivel kisebb, mint 20%.)



6.13. ábra — a) A térfogati hányad szerinti eloszlásfüggvény alapján hasáb, illetve ellipszoid alakú részecskékkel felépített multiskála modellből (MMM) kapott eredmények összehasonlítása az egyrészecskés 20% térfogati hányadú modellekkel (henger, hasáb, ellipszoid), illetve a korábbi párhuzamos (Voigt) és soros (Reuss) átlagolási módszer, valamint az átlagolásiablak-módszer eredményeivel. b) Az ellipszoidmodelleken a termikus feszültségek figyelembevételével és anélkül kapott eredmények összehasonlítása

Az alsó határként számon tartott soros átlagolási modellgörbe a kísérleti görbét 2,5%-nál metszi. Mivel ezt az alsó határt semmilyen ugyanezen az eloszlásfüggvényen alapuló átlagolási módszerrel nem lehet túllépni, ezért kijelenthetjük, hogy ezen modell típusokkal nem lehet ennél a deformációnál nagyobb tartományban a kompozit viselkedését leírni. Ez azt jelenti, hogy ennek a tartománynak az eléréséhez már nem elegendő a statisztikai átlagokon nyugvó, a környezetének hatásait csak átlagos mértékben figyelembe vevő, magányos részecskét tartalmazó modell felépítése, hanem már több részecske kollektív viselkedését kell számításba venni.

Érdeemes megfigyelni, hogy a 6.13a ábrán szintén feltüntetett átlagolásiablak-módszerrel kapott modellgörbe a hasáb alakú részecskét tartalmazó modellekéhez hasonlóan indul, majd a könyökpont környékén eltávolodik tőlük. Ez annak a már említett modellfilozófiában való rokonságnak tudható be, hogy az átlagolásiablak-módszer is közelíti a részecskealakot. Mégpedig úgy, hogy a valódi részecskealakot közelíti az átlagolási cellák méretének megfelelő rácson vett szerkezeti mintavételezéssel. Így impliciten a részecskealak mindig kicsit téglatest alakhoz hasonlatos lesz, a modellezett anyagi térfogatra vett egységes szabályok alapján. Ez tükröződik a görbe kezdeti szakaszán, majd a teljes kompozittérfogatra kiterjedő képlékeny alakítás során ez a kezdeti hatás eltűnik, és az alakítási keményedést viszonylag jól becsülve halad tovább a görbe, metszve a most tárgyalt multiskálás modellek görbéit. Ez azzal magyarázható, hogy míg az egységcellás modellek nem alkalmasak a kompozit nagyobb deformációjának a leírására, hiszen a

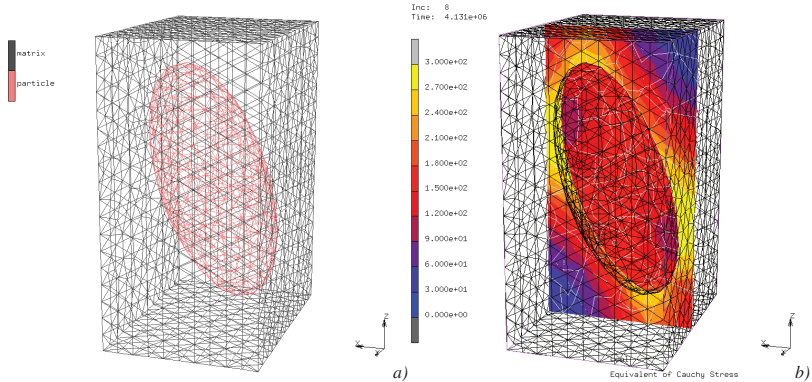
részecskék, illetve a lokális térfogatok valódi térbeli elhelyezkedését és kölcsönhatását nem tudják reprodukálni, addig az átlagolásiablak-módszer éppen ezt a térbeli elhelyezkedést közelíti jól. Tehát megállapítható, hogy a kompozit válaszában kis deformációkhoz tartozó felfutó részét a térfogati hányadon kívül döntően a részecskealak határozza meg, míg a kezdeti könyökpont utáni szakaszt már a részecskék egymáshoz képesti térbeli elhelyezkedése és kölcsönhatása is erősen befolyásolja.

Az egységcellamodellek esetén is megvizsgáltuk a termikus belső feszültségek hatását. Ezen kezdeti belső feszültségek figyelembevételével és anélkül kapott modellgörbéket szemlélteni a 6.13b ábra. Megfigyelhető, hogy a belső feszültségek elsősorban a görbe kezdeti felfutására vannak hatással, majd a könyökpont után mindegyik modell kis különbségekkel, de többé-kevésbé ugyanazt az alakítási keményedést mutatja. Ebből az következik, hogy az anyag viselkedését csak a kis deformációk tartományában befolyásolja jelentősen a belső feszültségek jelenléte, mégpedig gyorsabb makroszkopikus megfolyást eredményez, amivel meghatározza az anyag további deformációja során fellépő makroszkopikus folyásfeszültséget, de a deformáció belső mechanizmusaira már nincs jelentős hatással. Továbbá az is következik, hogy az egységcellán belül kialakuló belső feszültségek még kicsik ahhoz, hogy jelentős kölcsönhatást feltételezzünk a szomszédos lokális térfogatok között, elegendő az átlagtér-közelítés. További érdekesség, hogy a multiskálás és az egységcellás modellek eredményeinek közel egyforma voltát nem befolyásolja számottevően a termikus belső feszültségek figyelembevétele. Tehát az előbbi megállapítás nem csak a 20%-os térfogati hányadú, hanem a többi egyrészecskés modellre is — térfogati súlyukat figyelembe véve — jó közelítéssel igaz.

6.3.3.5 A módszer további javítása

Az egyrészecskés modell előnye, hogy kevés paraméterrel rendelkezik, így viszonylag könnyű egy-egy paraméter változtatásával megvizsgálni, hogy mennyire van hatással a modell deformációval szembeni válaszára. Az 5.2 fejezetben részletezett szerkezetanalízis során felmerültek olyan szerkezeti jellemzők is, amelyeket eddig nem vettünk figyelembe, viszont látva az ellipszoidrészecskéket tartalmazó modell kiváló működését, lehetőségünk nyílik további szerkezeti paraméterekkel finomítani, azt a célt szem előtt tartva, hogy szélesebb deformációtartományban leírassuk a valódi anyag viselkedését. Az eredményekből várhatóan az is kiderülne, hogy ezek az újonnan számításba vett mikroszerkezeti tulajdonságok mennyire lényegesek az anyag mechanikai viselkedése szempontjából. Eszerint az 5.2.2 alfejezetben tárgyalt részecskeorientáció hatásait is megvizsgálhatjuk a már bevált módon, azaz a különböző részecskeorientációjú modellek eredményeit az 5.4. ábra eloszlásfüggvénye alapján történő összegzésével. A modellezésben mindössze az okozza a nehézséget, hogy mivel elromlik a modell térbeli tükrörszimmetriája, nem elégséges csak az egységcella térfogatának nyolcadát modellezni, hanem az egészet kell (6.14. ábra). Ez jelentős többletszámítást jelentene, ezért a végelemek

számának, így a térbeli felbontásnak is a kényszerű csökkentését vonja maga után. Ugyanezt mondhatjuk el az 5.2.4.4 alfejezetben tárgyalt excentricitás kezeléséről is, amelyet ugyanezen a módon az 5.7. ábra eloszlásfüggvényeivel súlyozottan lehet kiértékelni. Kihasználjuk azt a kedvező körülményt, hogy a térfogati hányad Gauss-eloszlása miatt a multiskálás modell ugyanazt az eredményt szolgáltatja, mint az átlagos térfogati hányadú egységcellamoddell. Ezért a részecskeorientáció és excentricitás paraméterek hatásának tanulmányozását is csak ez utóbbi modellek segítségével végezzük. Azonban mind a két esetben a termikus belső feszültségek szimulációját is végrehajtjuk az összenyomás előtt.



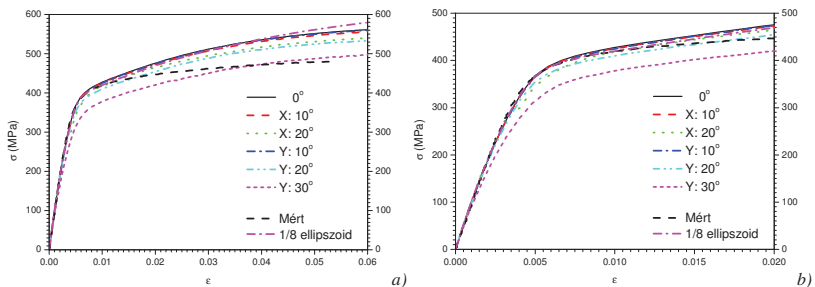
6.14. ábra — Az Y tengely körül 20° -kal elforgatott ellipszoidrészecskét tartalmazó egységcellamoddell (a), valamint a $0,23\%$ -os külső deformációhoz tartozó ekvivalens Cauchy-feszültség kontúrábrája az egységcella középső, Y-ra merőleges síkjában (b). A feszültségértékek MPa-ban értendők.

A részecskék orientációjának az alakítási görbékre való hatását úgy vizsgáltuk, hogy a részecske kistengelye (X), illetve középső tengelye (Y) körül elforgattuk a részecskét az egységcellamoddell belülről, az Y tengely körül 20° -ban elforgatott részecskét tartalmazó modell felépítését illusztrálja a 6.14a ábra. Ezek a modellek puhább anyagként viselkednek, mint a nagytengelyükkel Z irányban álló részecskéket tartalmazó modellek, amit a 6.14b ábra alapján azzal magyarázhatunk, hogy már kis deformációk esetén hamar kialakulnak olyan tartományok, ahol a mátrix megfolyik, miközben egyes tartományokban szinte nincs feszültség. Az 5.4 ábra szerint kicsi a valószínűsége, hogy egy részecske nagy szögben fordul el, amiből az következik, hogy nem várhatunk a részecskeorientáció eloszlásának figyelembevételétől nagy hatást a multiskálás modell által adott anyagi válaszbán. A releváns szögtartományt 10° -os lépésekre felosztva a kísérleti eloszlásfüggvény alapján 7 különböző osztályba soroltuk az 1% -nál valószínűbben előforduló eseteket. Ezeket a forgatási szögparamétereket a 6.1. táblázat tartalmazza. A szögtartományokat úgy értjük, hogy például az 1-es számú modell azokra a részecskékre vonatkozik, amelyek nagytengelye a Z tengelyhez képest -5° és 5° közötti szögben áll, és ugyanakkor a kis- és középső tengelye 85° és 95° közötti szögben áll. Megfigyelhető, hogy például a kistengely körül való 10° -os elfordulás kétszer olyan valószínű, mint ugyanez a középső

tengely körül (2-es és 5-ös számú modell). Az így kiválasztott szög tartományok a valódi szerkezetben megfigyelhető összes eset 70%-át lefedik. A valószínűségeket a részecskék térfogatával súlyozva állapítottuk meg.

N	$\alpha_Z^{a_1}$	$\alpha_Z^{a_2}$	$\alpha_Z^{a_3}$	p_N
1	90	90	0	0,50
2	80	90	10	0,18
3	70	90	20	0,11
4	60	90	30	0,03
5	90	80	10	0,08
6	90	70	20	0,07
7	90	60	30	0,03

6.1. táblázat — Az eloszlásfüggvények alapján kiválasztott különböző részecskeorientációjú modellekben a részecske kis- (a_1), középső (a_2) és nagytengelyeinek (a_3) a Z tengellyel bezárt szöge (α_Z) fokokban kifejezve. N a modell sorszámát, míg p_N a hozzá tartozó előfordulási valószínűséget jelöli.



6.15. ábra — A sajtolás irányához képest X, illetve Y tengely körül 10°-kal, 20°-kal illetve 30°-kal elforgatott részecskéket tartalmazó egyszécskés egységcellamodellek által szolgáltatott feszültség-deformáció görbék (a), és a releváns tartomány kinagyítva (b). Feltüntetjük a tükrös határokkal modellezett nyolcadtér ellipszoid eredményeit is az eredmények összehasonlíthatósága céljából.

A különböző részecskeorientációjú modellek eredményeit néhány példán keresztül a 6.15. ábra szemlélteti. Az ábrán feltüntetjük a tükrösszimmetria figyelembevételével eddig használt, az egységcella nyolcadát behálózó végelelemmodell eredményét is a 0°-os dőlésű ellipszoid esetén. Összehasonlítva a teljes egységcellát alkalmazó modellel becsülhető a felbontás romlásából, valamint a tükrösszimmetria-peremfeltételek szigorúbb megköveteléséből származó hiba, amely a görbék releváns tartományában 2% alatt marad. A nyolcadtér fogattal dolgozó modell görbéje kb. 4%-os deformációig a teljes térfogatot alkalmazó modell görbéje alatt marad. Megfigyelhető, hogy mindegyik elforgatott részecskés modell alacsonyabb effektív folyásfeszültséget ad, mint a 0°-os modell, és az X tengely körül 10°-kal, illetve 20°-kal elforgatott részecskék esetének kivételével ez áll fenn a Young-modulusokra is. Korábbi megfontolásokban azt vártuk, hogy az elforgatott részecskék lecsökkentik az effektív Young-modulust, azonban az előbb kivételként említett két leggyakoribb elforgatott modell 0,5 GPa-lal, illetve 1,5 GPa-lal nagyobb Young-

modulust ad, mint a nem elforgatott. Ennek köszönhetően a modell effektív Young-modulusa alig csökkent.

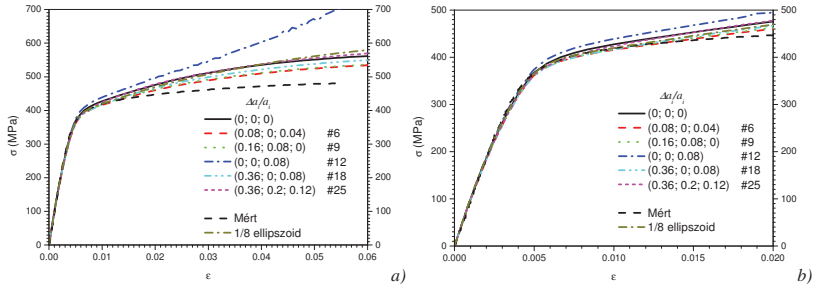
N	$\Delta a_i/a_i$			p_N	N	$\Delta a_i/a_i$			p_N
	X	Y	Z			X	Y	Z	
1	0,16	0,04	0,08	0,0573	21	0,32	0,16	0	0,0200
2	0,04	0,08	0,04	0,0516	22	0,20	0,08	0,12	0,0198
3	0,04	0,12	0,12	0,0465	23	0,20	0,24	0,04	0,0196
4	0,36	0,04	0,04	0,0455	24	0,36	0,2	0,04	0,0193
5	0,28	0,04	0,04	0,0388	25	0,36	0,2	0,12	0,0193
6	0,08	0	0,04	0,0387	26	0,16	0,04	0,04	0,0189
7	0,04	0,04	0,12	0,0378	27	0,16	0,2	0,04	0,0187
8	0,36	0,04	0,12	0,0376	28	0,36	0,24	0,04	0,0184
9	0,16	0,08	0	0,0364	29	0,24	0,04	0,04	0,0181
10	0	0,12	0,08	0,0310	30	0,36	0,12	0,08	0,0180
11	0,36	0,08	0,04	0,0308	31	0,36	0,24	0,12	0,0178
12	0	0	0,08	0,0274	32	0,24	0	0	0,0174
13	0,36	0,12	0,04	0,0252	33	0,36	0,24	0	0,0168
14	0,00	0,24	0,04	0,0247	34	0,32	0,12	0,04	0,0168
15	0,20	0,12	0,08	0,0244	35	0,36	0,12	0	0,0167
16	0,08	0,16	0,04	0,0228	36	0,36	0,2	0,08	0,0167
17	0,16	0,04	0,12	0,0213	37	0,08	0,04	0,12	0,0161
18	0,36	0	0,08	0,0209	38	0,16	0,08	0,04	0,0160
19	0,04	0,04	0	0,0208	39	0,16	0,24	0,04	0,0160
20	0,36	0,12	0,12	0,0205					

6.2. táblázat — Az eloszlásfüggvények alapján kiválasztott excentrikus modellek $\Delta a_i/a_i$ egységeiben kifejezett eltolásvektorai a három fő irány (X, Y, Z) szerinti komponensekben megadva. N a modell sorszámát jelenti, míg p_N a hozzá tartozó előfordulási valószínűséget.

A részecskének a lokális mátrixtérfogat középpontjából való eltolódásának a hatását a részecskeorientáció hatásának tanulmányozásával hasonló módon közelítettük meg. A három irányban történő eltolódások együttes valószínűsége szerint a 39 leggyakoribb esetet választottuk ki modellezésre, amelyek kb. a 36%-át ölelik fel a valódi anyagban talált lehetséges megvalósulásoknak. Ezeket az eltolási vektorokat előfordulási valószínűségük szerint sorba rendezve a 6.2. táblázat tartalmazza. Néhány excentrikus modellt kiválasztva a 6.16. ábrán látható modellgörbéket kapjuk, amelyeken már észrevehető, hogy nem csak puhább, hanem keményebb anyagi választ is kapunk az alapmodellhez képest. Elsősorban azok a modellek mutatnak nagyobb folyásfeszültséget, amelyekben a részecske a külső terhelés irányában toldott el, valamint kisebb

folyásfeszültséget, amelyekben a részecske a kis- vagy a középső tengely irányában a terhelés irányára merőlegesen tolódtak el.

Megjegyezzük, hogy általában egy paraméter változtatásának hatásait is nehéz értelmezni, több különböző paraméter együttes változtatásáét, és e paraméterek közötti esetleges kapcsolat már szinte reménytelen. Az orientáció és az excentricitás paraméterek már önmagukban is rendre két-, illetve háromdimenziós paraméterek, továbbá várhatóan nem olyan markáns hatással rendelkező paraméterek, mint például a térfogati hányad, tehát a modellekben csak másodlagos hatást várunk változtatásuktól.

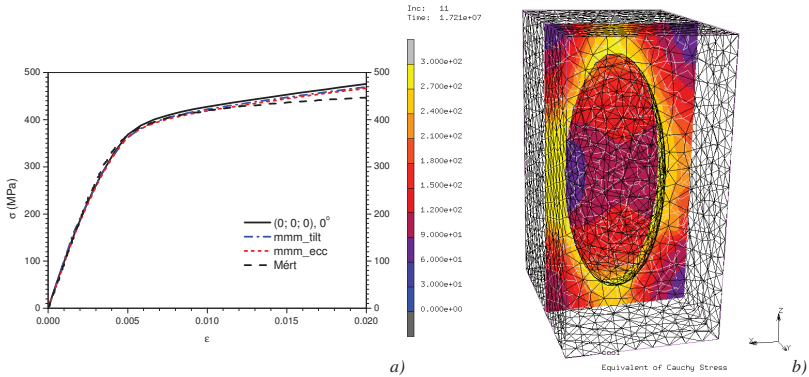


6.16. ábra — Néhány excentrikus modell alakítási görbéje (a), és a releváns tartomány kinagyítva (b). A középpontból való eltolás vektorát $\Delta a/a$, egységekben tüntettük fel. Az eltolási vektorok mellett a modell sorszáma látható (6.2. táblázat). Ábrázoltuk a tükröhatárokkal modellezett nyolcad ellipszoid eredményeit is az eredmények összehasonlíthatósága céljából.

A fentiekben részletezett részecskeorientáción és excentricitáson alapuló modelleket egy-egy véletlen csatolású multiskálás modellé összeépítve a 6.17a ábrán látható eredményeket kaptuk, amelyekkel az átlagos egységcella görbéjét és a kísérleti görbét hasonlítottuk össze. Ezekben az esetekben is meggyőződünk arról, hogy a modellek különböző véletlen megvalósításai ugyanazt az eredményt adják.

Ahogy vártuk, a görbék valóban csak kis mértékben térnek el az átlagos egységcellamodelltől. Így a 6.17a ábra alapján kijelenthetjük, hogy a részecskék orientációjában és excentricitásában mutatkozó heterogenitásnak — a valódi kompoziton kapott eloszlásfüggvényekkel figyelembe véve — nagyon kis hatása van a véletlen felépítésű multiskálás modellekre, holott az egyes modellgörbéken megfigyelhettük e paraméterek kifejezett hatását. A kísérlet és e multiskálás modellek közötti egyezés ugyan tovább javult, azonban még mindig 6%-nál, illetve 4%-nál nem lesz jobb a 2%-os deformációnál kapott feszültség a részecskeorientáció, illetve az excentricitás figyelembevétel esetén. Másik érdekes jelenség, hogy az excentrikus multiskálás modell Young-modulusa 95 GPa-nak adódott. A 6.17b ábrán illusztráltuk, hogy már egy kismértékben eltolódott részecske esetén is feszültségkoncentráció alakulhat ki, azaz könnyen eléri a folyásfeszültséget és kezd el képlékenyen alakulni a mátrix. Egy nagyobb mértékben eltolódott részecske esetén (különösen, ha Z irányban toódik el), ez egészen kis külső terhelésre is megtörténhet. Tehát már kis deformáció esetén is történhet képlékeny alakváltozás. Ez a

multiskálamodellben azt jelentheti, hogy már a görbe kezdeti szakaszában is jelen van lokális képlékeny alakítás, amely a Young-modulus innen leolvasott értékét csökkenti. Emiatt ezt az értéket nem tekintjük a modell valódi Young-modulusának.



6.17. ábra — (a) A részecskeorientáció és az excentricitás eloszlásfüggvényei alapján súlyozott multiskálamodellek feszültség–deformáció grafikonjai. (b) A 9-es számú excentrikus modell, ahol részecske közepén átmenő síkban látható 0,27% külső deformáció esetén az ekvivalens Cauchy-feszültség kontúrabrója. A feszültségértékek MPa-ban értendőek.

Mivel mindkét szerkezeti paramétról bebizonyosodott, hogy külön-külön csak kis mértékben befolyásolják a modellek eredményét, ezért várhatóan egy részletesebb, mindkét mennyiséget figyelemmel kísérő modell sem írná le sokkal jobban a kísérleti görbét. Egy ilyen modell megtervezéséhez a két paraméter ötdimenziós együttes valószínűségi függvényét kellene elemezni, ami már önmagában igen bonyolulttá tenné a feladatot. Ezzel elvesztené az eddigi egyszerűségét, hogy értelmezni tudjuk a kompozit viselkedését, nem beszélve arról, hogy mérnöki alkalmazásra sem lenne alkalmas. Mindezek miatt nem tartottuk érdemesnek a modellek további fejlesztését.

6.3.3.6 A módszer alkalmazhatósága

Azt az eredményt kaptuk tehát, hogy egy Gauss-szerű eloszlást követő LTTH esetén a véletlen csatolású multiskálamodell válasza gyakorlatilag ugyanaz, mint az egységcellás átlagterközelítése. Ez azt jelenti, hogy a kompozit heterogenitásának ilyen szempontból nincs lényegi hatása, ami ellentmond más irodalmi eredményeknek [95], [96].

A várakozásoknak megfelelően a névleges térfogati hányadú egységcellás modell, és így a multiskálás modell is, az alakítási görbe kezdeti szakaszát jól írja le. Azonban nagyobb deformációkra mindkét modell nagy alakítási keményedést jósol, amellyel ezt a kiváló egyezést elveszti. 2,5%-os deformáció fölött már az alsó határként szolgáló soros csatolású átlaggörbe is magasabb folyásfeszültséget ad, mint a kísérleti görbe. Ez a deformációérték az ilyen típusú egységcellás modelleknek az alkalmazhatósági határát adja meg.

A legfontosabb azonban, hogy a részecskék alakját jól kell megválasztani a modellek felépítések, mert nem megfelelő részecskealak, mint például hasáb vagy az itt nem részletezett axiszimmetrikus végelelemmodellel vizsgált hengeres részecskealak (6.13a ábra) esetén mind az egységcellás modellek, mind a multiskálás megfelelőik messze túlbecslik a feszültségeket.

6.3.4 Konklúziók a mikroszerkezeti statisztikán alapuló módszerekre vonatkozóan

Az átlagolásiablak-módszerben a kiindulási térfogatot a mikroszerkezeti korrelációs hosszknál jóval nagyobbak (9–10-szeresnek) választottuk, és ez alapján azt feltételeztük, hogy a térfogat fizikailag is reprezentatív. Az egységcellás modellezési stratégiában nem került elő a reprezentatív térfogatelem méretének problémája, viszont a lokális térfogatok mérete és a szerkezeti korrelációs hosszak jó egyezést mutatnak, ezért van létjogosultsága a lokális térfogatok statisztikáján alapuló modelleknek. A multiskálás modellek esetén pedig azt találtuk, hogy ha elegendően nagy térfogatba (kb. 16^3 egységcellányi) ágyazzuk be a megfelelő térfogati statisztika szerint az egyrészecskés modelleket, akkor a különböző véletlen felépítésű megvalósítások között a modell választásában nem tapasztalható különbség, tehát a modelltérfogat reprezentatívnak tekinthető. Azonban nem kaptunk eddig választ arra a kérdésre, hogy a geometriailag és a fizikailag reprezentatív térfogatelemek mérete milyen kapcsolatban van egymással.

Rámutatunk a részecskealak figyelembevételének fontosságára. Az arányaiban jól, de alakjában rosszul közelített részecske esetén nem kaptunk kielégítő közelítést a kísérleti eredményekhez. Azonban a bevezett alakfaktor szerint közeli alakú test (ellipszoid) esetén már jó közelítést kaptunk, tehát a kitűzött céljainkra ennél kifinomultabb alakú tulajdonságok nem voltak szükségesek. Ebből arra következtettünk, hogy a részecskék alakjának csak a közelítő körvonala számottevő. (Megjegyezzük, hogy természetesen az ennél komplexebb anyagi viselkedés, mint például anyagkárosodás modellezéséhez a részecskék pontosabb alakleírását kell alkalmazni.) Azt is megmutattuk, hogy a részecskék alakja döntően befolyásolja az alakítási görbe kezdeti, könyökpont körüli alakját, valamint a keményedési szakaszra is kihat.

Az átlagolásiablak-módszer és az egységcellás, valamint multiskálás modellek összehasonlítása alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy az alakítási görbe kiterjedt deformációtartományban történő leírásához már a görbe kezdeti szakaszát megfelelő részecskealakokon alapuló modellel kell közelíteni, amely így jó kiindulási állapotot nyújt a későbbi szakaszban a kollektív részecskeviselkedés modellezéséhez, ami pedig az alakítási keményedés kellő pontossággal történő leírását biztosíthatja.

Az egységcellás modellek a lokális, míg az átlagolásiablak-modellek a globális mikroszerkezet statisztikáján alapszanak. A lokális statisztikában nem jelenik meg a globálisban jellemző transzverzális izotrópia, azonban a globálisban ezt a jelenséget jól ki lehetett használni a módszer hibájának becslésére, amely mind a lineáris, mind a nemlineáris anyagi választásban

megjelent. A lokális statisztikán alapuló módszerek esetén fontos, hogy milyen külső mechanikai hatásra keressük a számunkra érdekes anyagi választ, ugyanis a modellalkotásnál ezeket a szempontokat kell szem előtt tartani. Az általunk felépített modellek az egytengelyű összenyomásra voltak adaptálva, valamint a Young-modulus és folyásfeszültség kísérlethez hasonló módon való meghatározását tűzték ki célul. Ezekre a modell alkalmazhatósági tartományán belül — kiváltképp a kezdeti szakaszra — kiváló anyagi választ adott. Az átlagolásiablak-módszer viszont a globális statisztikán alapszik, nincsenek kitérített kérdések, és így az anyagi válasz is univerzálisnak tekinthető a különböző terhelési módok esetén. Mi azonban e módszer esetén is a kísérlettel való összehasonlíthatóságot helyeztük előtérbe.

A módszerek alapjául szolgáló szerkezeti információkhoz szükség volt az anyag mikroszerkezetének háromdimenziós analíziséhez. Az anizotróp tulajdonságokat csak ilyen vizsgálatok után lehet érdemben modellezni. A lokális térfogatok elemzésekor kiderült, hogy a lokálisan átlagosan anizotróp tulajdonságú építőelemek együtteséből alakul ki a transzverzális izotrópia is. Itt nem részletezett, mikroszerkezeti statisztikán alapuló kétdimenziós modellek nem kellő pontosságú közelítéseket adnak.

Modell	Young-modulus (GPa)	Folyásfeszültség 2%-nál (MPa)
Átlagolásiablak-módszer	Z: 103 X-Y: 97–98	Z: 477 X-Y: 432–440
20% egységcellamodell (hasáb)	108	581
Soros átlagolás (hasáb)	106	481
Párhuzamos átlagolás (hasáb)	111	605
Multiskálamodell (hasáb)	120	582
20% egységcellamodell ($\frac{1}{8}$ ellipszoid)	103	469
Soros átlagolás ($\frac{1}{8}$ ellipszoid)	100	432
Párhuzamos átlagolás ($\frac{1}{8}$ ellipszoid)	102	490
Multiskálamodell ($\frac{1}{8}$ ellipszoid)	102	466
20% egységcellamodell ($\frac{1}{4}$ ellipszoid)	101	476
Multiskálamodell ($\frac{1}{4}$, orientáció)	101	470
Multiskálamodell ($\frac{1}{4}$, excentricitás)	95	467
Kísérlet	98	447

6.3. táblázat — A mikroszerkezeti statisztikán alapuló modellek esetén és a kísérlet során kapott Young-modulusok és a 2%-os deformációhoz tartozó folyásfeszültségek.

A részecskecsoportosulások mechanikai viselkedésben okozott hatását az átlagolásiablak-módszer impliciten figyelembe veszi, azonban az egységcella- és multiskálás modelleknel elő ránézésre úgy tűnhet, hogy elhanyagoltuk. Azonban a részecske és az azt körülvevő mátrix

karcúságadataiban statisztikusan megjelennek ezek a tulajdonságok, különösen az excentricitást, illetve részeskeorientációt is figyelembe vevő modellek esetén.

Ezeknél a modelleknél állandó technikai nehézségeket jelent a háromdimenziós modellek kellő felbontású számítógépes szimulációja. Éppen ezért jól megfontolt modellezési stratégiákat, a legfontosabb anyagi jellemzők figyelembevételével, fizikailag indokoltan leegyszerűsítő alapelveket alkalmazó, a lehető legegyszerűbben előállítható modelleket kell választani.

A mikroszerkezeti statisztikán alapuló modellek lineáris és nemlineáris anyagi választó jellemző adatait a 6.3. táblázatban foglaltuk össze.

6.4 Közvetlen módszerek (többrészeskés modellek)

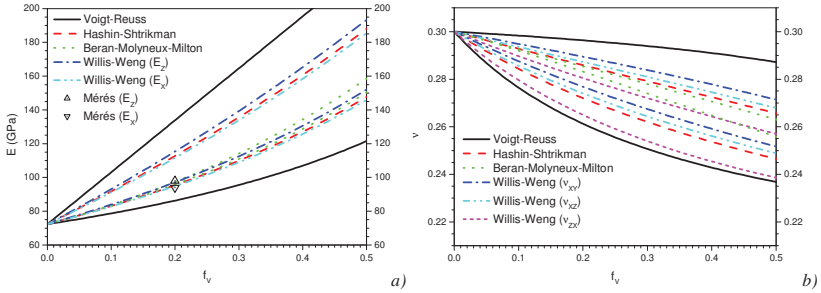
A mikroszerkezeti statisztikán alapuló, valamilyen fizikailag megalapozott módon átlagoló módszerekhez képest másik megközelítési módot jelent a közvetlenül a rekonstruált szerkezetre épülő modellezési stratégia. Viszont ezek esetén látni fogjuk, hogy folyamatosan problémát jelent a nagy számítási igény, amelyet minimálisra kell csökkenteni, miközben a modellnek releváns eredményeket kell adnia, így fokozottabban előtérbe kerül a reprezentativitás problémaköre.

6.4.1 Rugalmas tulajdonságok vizsgálata közvetlen modelleken [S4]

Számos közelítő összefüggést dolgoztak ki heterogén anyagok rugalmas tulajdonságainak becslésére, mint arra utaltunk a 2.3 alfejezetben. Elsősorban statisztikusan izotróp anyagokra dolgoztak ki formulákat, azonban kevésbé ismert ezek alkalmazhatósága valódi anyagokra. Mivel a részeskeorientált kompozitokat napjainkban kizárólag a rugalmas alakváltozás tartományában alkalmazzák, ezért igen fontos rugalmas tulajdonságaik becslhetősége.

6.4.1.1 Rugalmas tulajdonságok becslése a mikroszerkezeti paraméterek alapján

A 2.3 alfejezetben ismertetett elméleti megfontolások alapján alsó és felső határt lehet adni a kompozitok rugalmas modulusaira. Ezek a becslések a térfogati hányad függvényében adnak határokat a rugalmas tulajdonságra. Ezeket a függvényeket ábráztuk az általunk vizsgált kompozitokra a Young-modulus esetére a 6.18a ábrán, valamint a Poisson-szám esetére a 6.18b ábrán. A legtagabb határokat a (88) alapján kiszámított Voigt- és Reuss-féle közelítés adja. Itt jegyezzük meg, hogy a Poisson-szám geometriai jellegű anyagi jellemző, ezért várhatóan érzékenyebb lesz a szerkezetre, mint a dinamikai jellegű modulusok. Az erre vonatkozó határok kiszámítása is csak a (19) összefüggések segítségével történhet, nem lehet közvetlenül a (88) definíciót alkalmazni. Továbbá a Poisson-szám esetén az alsó és felső határok ellentétes értelműek.



6.18. ábra — Az elméleti határok a kerámia fázis térfogati hányadának függvényében. Mind az alsó, mind a felső határokat feltüntetjük a Young-modulus (a) és a Poisson-szám (b) vonatkozásában. Az anizotróp határok esetén $\alpha = 1,22$ anizotrópiafaktorral számoltunk, valamint a kísérleti Young-modulus értékeket is feltüntetjük.

A Hashin–Shtrikman-féle kétponthatárok ennél sokkal szűkebb tartományt jelölnek ki, és a Voigt- és Reuss-féle határtól eltérően ezek csak izotróp anyag határaitként határozhatók meg a (94)–(97) összefüggések alapján. Ugyanígy izotróp háromponthatároként viselkednek a (98)–(103) alapján kiszámítható Beran–Molyneux–Milton-féle határok is, amelyeket itt most véletlen merevgömb-rendszer esetére számítottunk ki, és a statisztikus szerkezetleírókat az irodalomból vettük [22]. Annyira függenek a mikroszerkezettől, hogy már olyan szűk tartományt határoznak meg, amely megközelíti a mérések hibanaságát. Viszont emiatt az alkalmazhatósága is problémákba ütközhet, mivel például az általunk vizsgált esetben a kompozit Z irányban mért Young-modulusa felül, a transzverzális irányban mért pedig alul esik a határokon. Lényegében az átlagos Young-modulusra ad becslést, ez a kompozit anizotrópiája és a háromponthatárok erősen izotróp jellege miatt történik. Ezért fogjuk a továbbiakban nagyobb figyelemmel vizsgálni a kétponthatárként létező, olyan anizotróp anyagokra vonatkozó, a (128)–(140) összefüggések alapján kiszámított Willis–Weng-határokat, amelyek transzverzálisan izotrópok. Ezeket a határokat 5.2.5 fejezetben megállapított $\alpha = 1,22$ anizotrópiafaktorra számítottuk ki. Ekkor természetesen a határok már irányfüggőek is lesznek, így megkülönböztetünk a tengelyirányú (E_x) és a transzverzális irányú (E_x , E_y) Young-modulusra, valamint a hat különböző Poisson-számra, ν_{xy} -ra, ν_{yx} -re, ν_{xz} -re, ν_{yz} -re, ν_{zx} -re és ν_{zy} -ra vonatkozó határokat. Ez utóbbinál a második index a terhelés irányát jelzi, míg az első index azt az irányt jelöli, ahonnan a keresztirányú deformáció lett meghatározva. Megjegyezzük, hogy a transzverzális izotrópia miatt érvényesek a

$$(220) \quad E_x = E_y,$$

illetve a

$$(221) \quad \nu_{xy} = \nu_{yx}, \nu_{xz} = \nu_{yz} \text{ és } \nu_{zx} = \nu_{zy}$$

összefüggések, ezért elegendő csak két Young-modulusra, illetve három Poisson-számra vonatkozó határt figyelembe venni, valamint egymáshoz képesti viszonyukra a kompozit alkotóinak adatai alapján mindig érvényesek az

$$(222) \quad E_Z > E_X,$$

illetve a

$$(223) \quad \nu_{XY} > \nu_{XZ} > \nu_{ZX}$$

egyenlőtlenségek.

Az elméleti becslésekből származó, a vizsgált kompozitra vonatkozó határokat a 6.4. táblázatban foglaltuk össze. A legegyszerűbb Voigt- és Reuss-féle határok $\pm 22\%$ -os túrést engednek meg az átlagos érték körül. Az izotróp anyagot feltételező Hashin–Shtrikman-határok már csak $\pm 8\%$ -os, a háromponthatárok pedig $\pm 1\%$ -os túrést engednek meg. Ez utóbbi már a Young-modulus mérési hibájával megegyezik, ugyanakkor nem ad jó becslést, bár annak ellenére, hogy izotróp anyagra vonatkozik, a valódi anyagra a két mért Young-modulus közötti határokat jósol. A Willis–Weng-határok viszont 8% -os túrést mutatnak mind tengelyirányban, mind transzverzális irányban, mint a Hashin–Shtrikman-határok, azonban ezekhez képest az anizotrópiának megfelelően feljebb, illetve lejjebb tolnának el a tengelyiránynak, illetve a transzverzális iránynak megfelelően. Továbbá jó becslést adnak mindkét esetben: a mért értékek a vonatkozó alsó határ közelében vannak. Ebből az következik, hogy a forgásellipszoid szimmetriájú kétpont-korrelációs függvényből származó határok kellően pontosan közelítik a valódi anizotróp szerkezetet. Megjegyezzük, hogy a makroszkopikus térfogati hányad bizonytalansága miatt a közölt adatok az utolsó értékes jegyben különbözhetnek, csak a becslések különbségeinek érzékelteése miatt tartottuk meg őket.

Határ	$E_{alsó}$ (GPa)	$E_{felső}$ (GPa)	$\nu_{alsó}$	$\nu_{felső}$
Voigt–Reuss	86,3	133,9	0,296	0,261
Hashin–Shtrikman	95,5	112,5	0,286	0,272
Beran–Molyneux–Milton	95,9	97,4	0,285	0,283
Willis–Weng (E_Z, ν_{XZ})	97,1	115,4	0,287	0,274
Willis–Weng (E_X, ν_{ZX})	94,8	111,6	0,281	0,265
Willis–Weng (ν_{XY})	–	–	0,290	0,277

6.4. táblázat — A 20%-os névleges térfogati hányadra vonatkozó a 6.18. ábrán szereplő határok számértékei. A Poisson-számra vonatkozó alsó/felső megjelölések ellentétes értelműek.

6.4.1.2 A módszer elve

A holotomografikus rekonstrukcióból származó, majd a teljes térfogat közepéből kivágott, háromdimenziós képfeldolgozási lehetőségekkel a lehető legjobban előállított 128^3 voxelből álló kompozittérfogatból indulunk ki. Feltételezzük, hogy ez tartalmazza az összes információt a szerkezetéről, amire szükségünk lehet. Ezért kínálkozik, hogy mivel minden egyes voxelének tudjuk az anyagi besorolását, mindegyikhez rendeljünk hozzá egy végeselemet. Ez azonban már olyan nagy modell felépítését jelentené, amelyet a jelenlegi számítógépekkel egyáltalán nem tudunk kiszámítani. A modellméret csökkentésével azonban lehetőség nyílik arra, hogy

kiszámítható, de még elegendően nagy térfogatokat válasszunk. A modellméreteket most is a 5.2.5 alfejezetben bevezetett ℓ_L és ℓ_T korrelációs hosszakhoz viszonyítjuk. Geometriailag elegendően nagynak tekinthetünk egy térfogatot, ha az élhossza legalább kétszer nagyobb, mint a nagyobbik korrelációs hossz. A kiválasztott térfogatok nagyságát akkor tarthatjuk fizikailag is elegendően nagyoknak, amikor a globálisan tapasztalható transzverzális izotrópiát mutatja. Ezekben a térfogatokon tehát mind a sajtolás irányában, mind arra merőlegesen el kell végeznünk az összenyomási szimulációkat.

A következő probléma a teljes térfogattól történő mintavétel kérdése. A 5.2.7 alfejezetben említett szerkezeti változatosság miatt várható, hogy a különböző helyről vett mintatérfogatok más-más eredményt szolgáltatnak, nekünk viszont a teljes térfogatra vonatkozó eredményre lenne szükségünk. Tehát a legkevesebb mintavétellel a legjobb lefedettséget biztosító módszert választottuk: egymás melletti diszjunkt mintatérfogatokkal „felparcelláztuk” a teljes térfogatot, ezzel biztosítottuk azt is, hogy a lehető legtöbb, különböző szerkezeti megvalósulások kerüljenek be az adott méretű mintatérfogatokba.

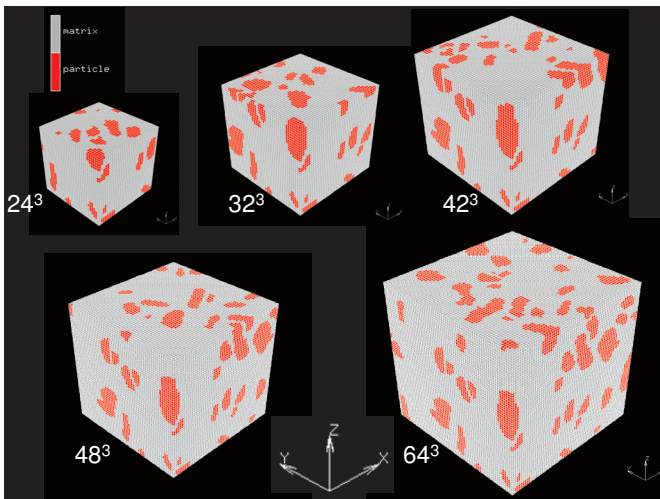
A mintavételek nagy száma, nagy térfogata és a három irányban történő szimulációk összességében nagy számításgigénye miatt a rugalmas tulajdonságok, azaz a Young-modulusok és a Poisson-számok meghatározására összpontosítottunk. Ezeket a mintaeredményeket pedig úgy kezeltük mint becsléseket a makroszkopikus mennyiségekre, és összehasonlítottuk a 6.4.1.1 alfejezetben bemutatott elméleti becslésekkel, valamint a kísérleti eredményekkel.

A 2.4 alfejezetben tárgyalt reprezentatív térfogatelem mérete meghatározásának kísérleti útját követve az ott felvázolt (iii) és (iv) kritériumok szerint járunk el. Eszerint a határfeltételektől való függetlenség kritériumát úgy valósítjuk meg, hogy a végtelen anyagból kivágott mintatérfogat koncepcióját követve az oldalsó lapokon a síkhatár feltételt írjuk elő, de a terhelést mind deformációvezérelten, mind feszültségvezérelten adjuk rá. Másrészt, mivel reményeink szerint el tudjuk érni a reprezentatívnak tekinthető mintaméretet, a (iv) kritérium szerint ezért elemeznünk kell majd a minták alapján kapott becslések szórását.

6.4.1.3 A közvetlen modellek megvalósítása

Az előzőekben elmondottak alapján a 128^3 voxel teljes térfogatú rekonstrukcióból vett mintatérfogatok alapján állítottuk fel a végeselemenként egy voxelnek megfelelő modelleket. A terhelést, illetve a határfeltételeket a már leírt módon határoztuk meg, és mind a három (X, Y, Z) irányban elvégeztük az egytengelyű összenyomást. Deformációvezérlés esetén mindig olyan kis deformációt (0,05%), illetve feszültségvezérlés esetén ennek nagyjából megfelelő feszültséget (50 MPa) adtunk az anyagra, hogy csak rugalmas deformáció jöhessen létre. A Young-modulust, valamint a Poisson-számot a térfogatra átlagolt valódi feszültségből és valódi deformációból számítottuk ki.

A kétszeres korrelációs hossznál a geometriai méretekből adódóan kényelmesen megválasztható mintaméretként a 32 voxel élhosszúságú kocka alakot választottuk. A 6.19. ábrán bemutatunk néhány modellt, amelyek illusztrálják, hogy a korrelációs hossz feletti méretnél milyen jellegű részecskeszerkezetet kell képzelni, ugyanakkor feltüntetünk egy kisebb (24^3) méretű modellt is, amely nem tekinthető még reprezentatívnak. A most ismertetendő szimulációs eredményeket 32^3 , 42^3 , 48^3 , 56^3 és 64^3 méretű modelleken végeztük. Ebből következően a teljes térfogat diszjunkt lefedésekor rendre 64 , 27 , 8 , 8 , 8 darab mintavételt kaptunk, tehát a 32^3 és 64^3 méretű modellek az egész, míg a 42^3 méretű modellek szinte az egész térfogatot tartalmazzák. A modellekben trilineáris interpolációt alkalmazó téglatest alakú végeselemeket használtunk. A végeselemháló nem kellő finomsága nagy hibát okozhat a deformációs és feszültségtér reprezentálásában [59], azonban ezekben a modellekben egy részecskét körülbelül átlagosan 170 voxel alkot, ami kielégítő. Továbbá azzal az előnnyel is rendelkezik, hogy a különböző modellek esetén a tomografikus felbontáshoz rögzített, így azonos a háló felbontása, tehát a hiba várhatóan azonos nagyságrendű.

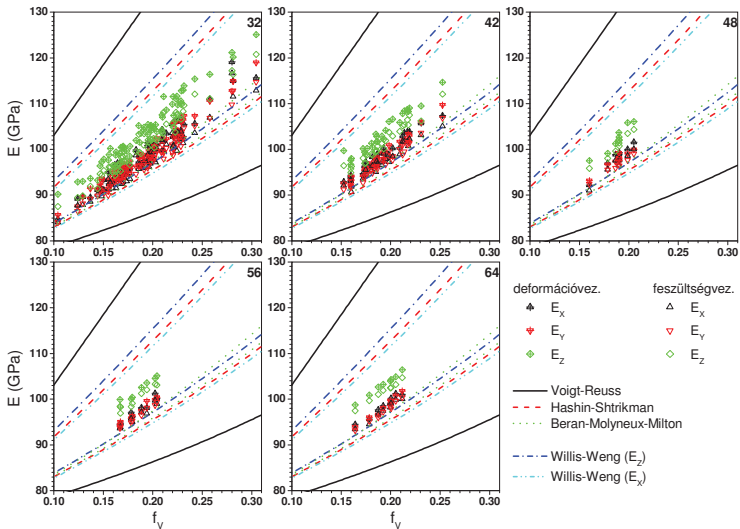


6.19. ábra — A teljes rekonstruált térfogatból ugyanon kivágott különböző méretű (24 , 32 , 42 , 48 és 64 voxel élhosszúságú) mintatérfogatokból felépített végeselemmodellek. A pirosan jelölt kerámiarészecskéknak és a szürkével jelölt mátrixnak a modell határán lévő része látható.

6.4.1.4 Rugalmas tulajdonságok

A különböző méretű közvetlen modellek esetén a Young-modulusokra kapott szimulációs eredményeket a 6.20. ábra mutatja a térfogati hányad függvényében. Feltüntetjük a 6.4.1.1 alfejezetben bemutatott, a kompozitra vonatkozó elméleti határokat is. Az ábrán a legszembeötlőbb jelenség a mikroszerkezeti változatosság megnyilvánulása, amelyet leginkább a térfogati hányad széles tartományra való szórásából észlelünk. Ez a szórás lényegesen csökken a

modellek méretének növekedésével. Például míg a legkisebb, 32^3 méretű modell esetén az f_v térfogati hányad 10 és 30% között, addig a legnagyobb, 64^3 méretű modell esetén 16 és 21% között változik. Az f_v változásával a Young-modulusok is változnak, a nagyobb modellek esetén már szinte egy egyenesbe rendeződnek az ábrázolt értékek. Ezért egy interpolációs módszert vezetünk be: egyenest illesztünk a szimulációs eredményekre, majd ennek a lineáris függvénynek vesszük a 20%-os névleges térfogati hányadhoz tartozó helyettesítési értékét, és ezt nevezzük az adott modell interpolált átlagos Young-modulusának. Az illesztések regressziós együtthatója minden esetben legalább 0,97 volt, ami alátámasztja az egyenessel való közelítés elfogadható pontosságát. Parabolaillesztéssel sem kaptunk szignifikánsan különböző átlagos Young-modulus értéket. Megjegyezzük, hogy várhatóan az elméleti határokat nyújtó kifejezések bonyolultságával lehetne valamilyen fizikai alapon nyugvó illesztési függvényt találni, azonban a szükséges pontosságot már az egyenessel való illesztés is biztosítja.



6.20. ábra — A különböző méretű, 32 , 42 , 48 , 56 és 64 voxel élhosszúságú modellek esetén a különböző irányokban a Young-modulusokra (E_x , E_y és E_z) kapott eredmények deformációvezérlés és feszültségvezérlés esetén. Feltüntetjük az elméleti izotrop és anizotrop határokat is.

Az elméleti becslésekkel történő összehasonlításban kitűnik, hogy a Voigt- és Reuss-határok közé esik minden adat, azonban érdekesebb, hogy a Hashin–Shtrikman-határok elég szélesek ahhoz, hogy a valódi anyagból kiválasztott mindegyik mintavételre számított Young-modulus ezen határok közé esik mind deformációvezérelt, mind feszültségvezérelt esetben. A Hashin–Shtrikman-határok alsó tartományában helyezkednek el a Beran–Molyneux–Milton-határok és csak kevés, a valódi szerkezetre kapott Young-modulus esik közéjük, és azok is a feszültségvezérelt esetben a transzverzális irányban mért modulusok közül kerülnek ki. Ennek a már említett okai vannak, azaz a sajtólási irányba a nagytengelyükkel beálló megnyúlt

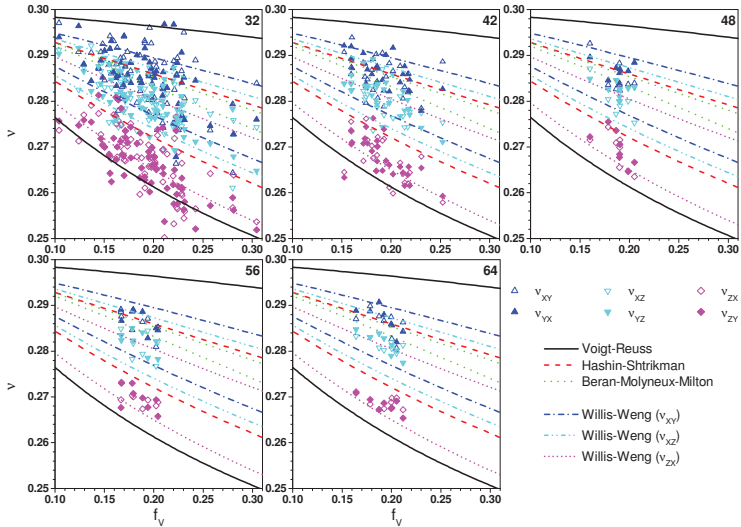
ellipszoidszerű részecskék jelentősen megváltoztatják a mikroszerkezet kétpontvalószínűségi-függvényeit és méginkább a hárompontvalószínűségi-függvényeit, ezért ezek elkülönülnek a véletlen merevgömb-rendszer statisztikus függvényeitől.

A Young-modulusok két csoportját lehet a grafikonokon megkülönböztetni, a magasabb E_Z , valamint az alacsonyabb E_X és E_Y értékek csoportját. Ez megfelel a transzverzális izotrópia következtében az anizotróp határokra érvényes (220) szimmetriatulajdonságnak, valamint a (222) egyenlőtlenységnek. A mikroszerkezeti transzverzális izotrópia tehát ismét megjelent a fizikai tulajdonságokban és alkalmas arra, hogy modellméretből fakadó, valamely fizikai tulajdonságra érvényes szórást jellemezzük.

A Young-modulusokhoz hasonlóan most ugyanazon modellekre a különböző irányokban mérhető Poisson-számokat is ábrázoltuk a 6.21 ábrán deformációvezérelt esetben. Mivel a feszültségvezérelt esetben kapott eredmények közel azonosak, 1%–0,5% különbséget mutatnak a deformációvezérelt esethez képest a modellméret növekedtével, ezért ezeket külön nem ábrázoltuk a grafikonon. Észrevehető, hogy a Poisson-számra már nem igaz minden szabályszerűség, amit a Young-modulusokra megállapítottunk. Például a szélesnek tekinthető Hashin–Shtrikman-határokat nem nevezhetjük a valódi anyag esetére is határoknak. Ugyanis abban az esetben, amikor a sajtolási irányban nyomjuk össze az anyagot, a transzverzális irányú deformációk alapján vett Poisson-számok (ν_{xz} és ν_{yz}) a határok közé esnek ugyan, de az egyéb típusú Poisson-számok kívül esnek a határokon még a legnagyobb, 64^3 voxel méretű modell esetén is. Ha a feszültségvezérelt eset eredményeit vizsgáljuk, ugyanerre a következtetésre jutunk. Ez az eredmény ismét az anizotrópiával, a részecskék irányítottságával magyarázható, és ebből következően kijelenthető, hogy a Poisson-szám érzékeny a szerkezeti anizotrópiára, ami összhangban van az erős geometriai jellegével. Ennek az anizotrópiának köszönhetően a modelleredményekből származó hatféle Poisson-szám elkülönül egymástól, és három csoportba sorolható, amelyek pontosan megfelelnek a (221) szimmetriatulajdonság szerinti és a (223) egyenlőtlenység szerinti Willis–Weng-határok három különböző értékének. A mátrix és a részecske Poisson-számainak ismeretében nyilvánvaló, hogy rendre akkor kapjuk a legkisebb, illetve legnagyobb Poisson-számokat a modellekre, amikor a transzverzális irányok egyike mentén nyomjuk össze és a sajtolási irányban mérjük a deformációt, illetve csak a transzverzális irányok játszanak szerepet. Jól megfigyelhető, hogy ennek a három csoportnak az eltolódása jó egyezést mutat a Willis–Weng-határok Hashin–Shtrikman-határokhöz viszonyított eltolódásával. Továbbá a szimulált adatok többnyire ezen anizotróp határok között helyezkednek el, és ez egyre határozottabban érvényesül a modellméretek növekedtével. A kivüleső pontok száma azért olyan nagy a kis modellméretek esetén, mert a lokális szerkezeti változatosságot tükröző α anizotrópia faktor lokálisan jelentősen különbözhet a globálisan érvényes értéktől. Következésképp kis

modellméretek esetén a globális értelemben számított anizotróp határokat kevésbé szigorúan kell értelmeznünk.

A grafikonok alapján arra következtethetünk, hogy a Poisson-szám kevésbé érzékeny a terhelési módra, mint a Young-modulus, mindazonáltal — összevetve ezeket a Hashin-Shtrikman-határokkal — kijelenthetjük, hogy a Poisson-szám érzékenyebb az anizotrópiára, amit már Weng is megjósolt forgásellipszoid alakú részecskék esetére [45]. Mind a Young-modulus, mind a Poisson-szám alapján lehet következtetni a valódi anyagból vételezett minták vonatkozásában a transzverzális izotrópia feltételezésének pontatlanságára az egyes csoportokon belüli, de különböző irányban vett rugalmas tulajdonságok szórásán keresztül.



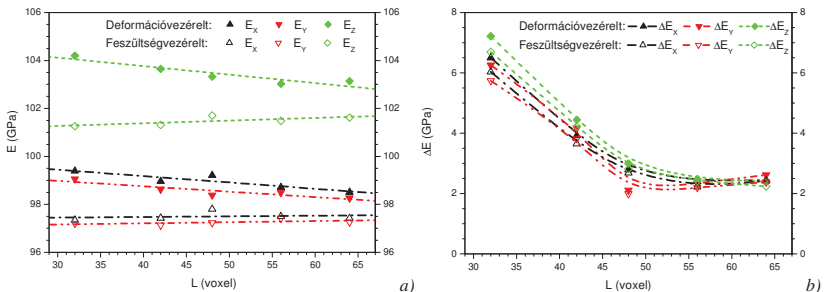
6.21. ábra — A különböző méretű, 32, 42, 48, 56 és 64 voxel élhosszúságú modellek esetén a különböző irányokban a Poisson-számokra (ν_{xy} , ν_{yx} , ν_{xz} , ν_{zx} , ν_{yz} és ν_{zy}) kapott eredmények deformációvezérlés esetén. Feltüntetjük az elméleti izotróp és anizotróp határokat is.

Konkrétabb következtetések levonásához tekintünk a 6.22. ábrát, amelyen az interpolált átlagos Young-modulusokat és statisztikus hibáikat tüntettük fel a modellek élhosszának függvényében! Az átlagos Young-modulusok is két csoportra oszlanak a szerkezeti anizotrópia szerint, továbbá az E_x és E_y értékek gyakorlatilag megegyeznek azonos határfeltételek (terhelési módok) esetén. Ebből szintén a transzverzális izotrópiára lehet következtetni és leolvasható, hogy statisztikusan kb. 1%-os mértékben teljesül is a valódi anyagra, még a legkisebb 32^3 voxeles modellméret esetén is. Azonban ekkora méretnél még a két különböző terhelési móddal kapott modulusok közötti különbség jelentős.

Lineáris illesztést végezve az interpolált átlagos Young-modulusokra kis, rendre pozitív, illetve negatív meredekségű egyeneseket kapunk a feszültségvezérlés, illetve a deformációvezérlés szerint. Azonnal adódik a 2.4 alfejezetben tárgyalt, határfeltételektől való

függetlenséget megfogalmazó (iii) kritérium alkalmazásának lehetősége: az összetartozó egyenesek metszéspontja definiálhatná a rugalmas szempontból reprezentatív térfogatot. Ez meglehetősen nagy méretet becsülne, körülbelül 90–100 voxel lineáris méretű térfogatot (kb. 190 μm), amely kétségkívül már reprezentatívnak tekinthető. Megjegyezzük, hogy természetesen nem állítjuk, hogy egyenesekkel leírható az interpolált átlagos Young-modulusok viselkedése a modellméret függvényében, de gyakorlati szempontból jó becslésnek vehető. Ugyanebből kifolyólag a metszéspontok létezését sem mondhatjuk ki. Valószínűsíthető, hogy az összetartozó Young-modulusok matematikai értelemben csak a végtelenben érik el egymást.

Ha most azonban továbbgondolva a szórások eltűnését előíró (iv) kritérium alkalmazhatóságát, a Young-modulus kb. 2%-os mérési bizonytalanságát is figyelembe kell vennünk. Mivel a makroszkopikus anyagon végzett kísérletek során sem tapasztalhatunk 2%-nál kisebb szórást a Young-modulusban, ezért az egyenesek távolságában sem követelhetünk meg ennél kevesebbet. Ebből a megfontolásból a 6.22a ábra alapján már csak 45–50 voxeles lineáris méret (kb. 95 μm) adódik. Ha azonban a 6.22b ábra alapján a statisztikus hibát vizsgáljuk, akkor szembetűnik, hogy a 48^3 voxel méretű modelltől kezdve közel állandóvá válik, és megegyezik a kísérletek során tapasztalt hibával, tehát ez alapján kb. 48 voxeles lineáris méret adódik a reprezentatív térfogategyre. Utalva a 2.4.2 alfejezetben leírt, az ekvivalens homogén anyaggal való helyettesítésen alapuló (ii) kritériumra épülő elméleti becslésekre, valamint az ezzel összefüggésben a 2.4.3 alfejezetben leírt szimulációs becslésekre az adódik, hogy ezek a véletlen elrendeződésű, izotróp, heterogén gömbmodellekre vonatkozó becslések lényegesen kisebb reprezentatív térfogatot adnak, mint amit az imént a valódi anyagon kaptunk. Ha a valódi anyagra kapott kb. 6–7 voxel (12–14 μm) nagyságú ekvivalens gömbátmérőt vesszük alapul, akkor a 2%-os hibához tartozó reprezentatív térfogategyem mérete 6–7-szerese ennek, amely jóval nagyobb, mint a Drugan és Willis által véletlen gömbmodellre kapott 1,8-szeres faktor. Ez az összehasonlítás kiemeli a valódi anyag részecskéi alakjának, méretének és elrendeződésének fontosságát.



6.22. ábra — Az interpolált átlagos Young-modulusok (a) és statisztikus hibáik (b) a modellméret (L) függvényében deformációvezérelt és feszültségvezérelt esetben. Ábrázoltuk az interpolált Young-modulusokra illesztett egyeneseket is. A statisztikus hibákat összekötő vonalak csak a szem vezetését segítik elő.

A végeelemmodellekből kapott eredmények alapján a valódi anyag effektív Young-modulusát a sajtolási irányban $E_Z^{eff} = 102 \pm 2$ GPa, valamint a transzverzális irányokban $E_{XY}^{eff} = 98 \pm 2$ GPa értékűnek becsüljük. Ezek az értékek 2%-os hibát feltételezve közeli egyezést mutatnak a kísérleti értékekkel. Néhány szimulációt a trikvadratikus interpolációs polinomokat alkalmazó végeelemekkel megismételve a legkisebb méretű modellekre minden esetben kb. 1 GPa-lal kisebb Young-modulus adódott. (Ezek kb. 15-ször hosszabb számítási időt igényeltek, mint a trilineáris interpolációs polinomok.)

6.4.1.5 A módszer alkalmazhatósága

Végeredményben egy viszonylag egyszerű módszert adtunk arra, hogy egy valódi kompozit tomografikusan rekonstruált háromdimenziós szerkezete alapján becslést adjunk az anyag effektív rugalmas tulajdonságaira. A módszer elveit követve valószínűsíthetően általánosan alkalmazható bármely heterogén anyagra a gyakorlatban, hiszen nem találtunk korlátozó tényezőket, mindössze egy elegendően nagy méretű rekonstruált térfogatra van szükségünk kiindulásként. A mintaveteli térfogat növelésével lehetővé vált a lokális szerkezeti változatosság hatásait átlagolni, és a közvetlen modellekkel a rugalmas tulajdonságok mérési pontosságát elérni. Így meg tudunk határozni egy gyakorlati szempontból kielégítő, nem túlságosan nagy méretet a reprezentatív térfogatra, amely az átlagos részecskeméret 6–7-szeresének adódott. Ez az eredmény jó egyezést mutat a celluláris anyagokra kapott empirikus értékkel [97].

6.4.2 Az átlagablakmódszer [S5]

Ebben az alfejezetben az eddig megszerzett szerkezeti ismereteket és modellezési tapasztalatokat összegezzük, amely lehetőséget nyújt egy optimális modellezési stratégia megalkotásához, a valódi anyag szerkezetére épülő becslések felállításához.

6.4.2.1 A módszer elve

Az egyrészecskés egységcellamodellek esetén láttuk, hogy nem kaptunk sokkal jobb eredményt a kompozit deformációs görbéjére, ha egyre több szerkezeti paramétert vettünk figyelembe, miközben természetesen nem csak azok átlagával, hanem eloszlásával is számoltunk. Viszont a 6.4.1 alfejezetben leírt többrészecskés modellekkel már ígéretes eredményeket kaptunk a rugalmas tulajdonságokra, hiszen ekkor már a részecskék valódi térbeli elrendeződését is figyelembe tudtuk venni. Ugyanakkor az utóbbi modellek számítási igénye határt szabott a képlékeny tulajdonságok hasonló jellegű vizsgálatának.

Felmerül a kérdés, hogy hogyan lehetne kiterjeszteni a többrészecskés modellekkel történő vizsgálatokat a képlékeny alakítás tartományára is, illetve nem lehetne-e optimálisabban kiválasztani a modellezett tartományokat úgy, hogy statisztikus értelemben a részecskék lehető legjobb elrendeződését modellezhessük.

A statisztikusan ekvivalens modellezési stratégiák esetén a részecske és a mátrix átlagos szerkezeti paramétereit még viszonylag jól figyelembe lehet venni, de a háromdimenziós térbeli elrendeződést már bonyolult lenne a modellbe foglalni. Ezeket a nehézségeket elkerülhetjük a valódi szerkezet közvetlen modellezésével, annak árán, hogy a szerkezeti változatosság miatt több, illetve nagyobb modellméreteket számítunk. Ahhoz, hogy az átlagos tulajdonságokat meghatározzuk, több reprezentatívnak tekinthető térfogatot kell kiválasztanunk, és meg kell oldanunk azt a problémát, hogy hogyan válasszuk ki ezeket az elegendően nagy rekonstruált térfogattól. Erre több lehetőség is kínálkozik, azonban most csak az átlagablakmódszerhez szükséges, a lokális térfogati hányad vizsgálatán (5.2.7 alfejezet) alapulót ismertetjük.

A háromdimenziós rekonstruált térfogattól véletlenszerűen kiválasztva ablakokat, a szerkezet lokális változatosságának köszönhetően nem csak a részecskék elrendeződése, hanem a lokális térfogati hányad is különböző lesz. Mivel a lokális térfogati hányad az 5.12a ábra alapján Gauss-eloszlásúnak tekinthető, előnyös lehet eszerint úgy kiválasztani az ablakokat, ahogyan az egységcellamodellnél is kezeltük az eloszlásfüggvényt, azaz egyenletesen lefedjük a kísérletileg tapasztalt térfogati hányadok intervallumát, ezután pedig a kérdéses fizikai mennyiség sokaságátlagát képezzük az eloszlásfüggvényt mint súlyfüggvényt alkalmazva. Ehhez nyilvánvalóan nem elegendő térfogati hányadonként csak egy-egy ablakot kiválasztani, hiszen az egyező térfogati hányadú mintavételek esetén is különböző tulajdonságokat kaphatunk a részecskék elrendeződésének különbözősége miatt. Az átlagos tulajdonságot és annak szórását több szimuláció alapján határozzuk meg tudván, hogy a kisméretű ablakok esetén a térfogati hányadok eloszlása széles, míg a geometriailag reprezentatív térfogatnál nagyobb ablakok esetén jelentősen szűkül. Mint hamarosan látni fogjuk, ez utóbbi esetben mind az átlagos effektív mennyiségek, mind azok szórásának változása leírható a lokális térfogati hányad lineáris függvényeként. Mivel a lokális térfogati hányad eloszlásfüggvénye szimmetrikus, levezethető, hogy bármely lineárisan változó fizikai mennyiség fenti értelmű átlagos értéke megegyezik az olyan ablakok felhasználásával kapott átlagos értékkel, amelyek éppen az átlagos térfogati hányaddal rendelkeznek (ezt az állítást matematikailag a 9.2 Függelékben részletezzük). Ezeket hívjuk ezentúl átlagablaknak^{*}. Kiterjeszthetjük ugyanezen megfontolásokat a szórásokra is, amelyek egyre kisebbé válnak, ahogyan az ablakméret nő és a lokális térfogati hányad eloszlása közelíti a Gauss-függvényt. Másrészt a megközelítés a fizikailag reprezentatív térfogatelemre épül (2.4 alfejezet), amely a korrelációs hosszakból számított geometriailag reprezentatív térfogatelemmel ellentétben egy adott fizikai mennyiséghez kapcsolódik. Megjegyezzük, hogy Gusev — már a 2.4.3 alfejezetben is említett — számításai azt mutatták, hogy ha a térfogati hányadot állandónak tartotta véletlen szerkezetű, izotróp gömbmodellek esetén, akkor az átlagok igen gyorsan, míg a második momentumok lassabban konvergáltak [49]. Ez a gyors konvergencia elősegítheti, hogy kevesebb átlagablak kiválasztásával is már jól közelítő eredményt kapjunk.

^{*} angol elnevezése: mean window

Az átlagablakmódszer alkalmazásakor tehát várhatóan kis hibát kapunk az effektív tulajdonságokra, amely a térfogati hányad szerinti átlagolás következménye. Ezt a hibát a részecskék lokális elrendeződése befolyásolhatja.

6.4.2.2 A módszer megvalósítása

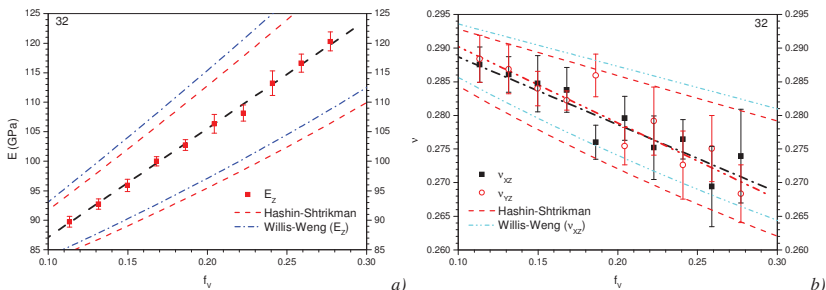
A módszer megvalósítása lényegében megegyezik a 6.4.1.3 alfejezetben leírt közvetlen modellek megvalósításával. A különbség ebben az esetben annyi lesz, hogy a képlékeny tulajdonságok szimulációjára is kiterjesztettük a végelelemmodelleket.

A mintavételezési eljárásban már nagyobb a különbség. Most nem a rekonstruált térfogat minél teljesebb lefedését, hanem a véletlenszerűen, de adott térfogati hányadot adó minták megtalálását tűzzük ki célul. A lényeges — a lehetséges esetek 96%-át tartalmazó — térfogati hányadra vonatkozó intervallumot felosztjuk kisebb tartományokra, majd mindegyikre kiszámítjuk az adott tulajdonság átlagos értékét tipikusan 5–10 ablak modellezéséből. Tehát a lényeges intervallumot az 5.12a ábra szerint az adott modellmérethez tartozó m átlag és σ szórás figyelembe vételével $[m - 2\sigma, m + 2\sigma]$ intervallumként határoztuk meg, ahol m értékét 19,53%-nak, σ értékét 0,0425-nek vettük.

6.4.2.3 Rugalmas tulajdonságok

Már a 6.20 ábrán is megfigyelhető volt, hogy a Young-modulusokra kapott értékek mindhárom irányú összenyomás esetén mindkét típusú peremfeltételre a modellméret növekedésével egyre inkább közelítőleg egy egyenes mentén helyezkednek el. Például a 48 voxel élhosszúságú modell esetén a Z irányú, deformációvezérléssel kapott értékekre egyenest illesztve magas értéket, 0,981-et kapunk a regressziós együtthatóra. Ezt a lineáris tulajdonságot most az átlagablakmódszernél alkalmazandó mintavételi eljárással is megvizsgáljuk. A Z irányú Young-modulusra kapott eredményeket a 6.23a ábra mutatja. Itt az átlagokat és a szórásokat öt-öt különböző modell szimulációjából kaptuk. Az átlagos Young-modulusokra egyenest illesztve a regressziós együttható 0,998-nek adódik. Ebből következően az igen jó közelítéssel lineáris kapcsolat alapján a makroszkopikus Young-modulus értékére becslést adhatunk úgy is, hogy az átlagos térfogati hányaddal rendelkező ablakokra számítjuk ki az átlagos Young-modulus értékét. Ezzel jelentős számítási költséget tudunk megspórolni. Ugyanezek a megállapítások elmondhatóak a Poisson-szám esetére is, azonban a ν_{xz} és ν_{yz} értékére kapott eredmények alapján (6.23b ábra) ismét megfigyelhetjük azt a már korábban megállapított tulajdonságát, hogy a szerkezeti részletekre érzékeny. Mindazonáltal az átlagok, illetve az azokra illesztett egyenesek már igen jól visszaadják az átlagos viselkedést, amelyet a transzverzális izotrópia megnyilvánulása alapján a grafikonokról leolvashatunk. Továbbá mindegyik átlagos rugalmas tulajdonság a Willis–Weng-határok közé esik, ezen túl még a Hashin–Shtrikman-határok is közrezárják az átlagos értékeket. Megjegyezzük, hogy az előbbieken átlagolási módszerről nem

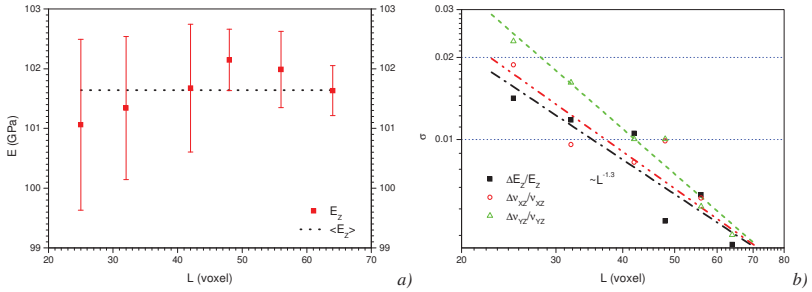
ejtettünk szót, mivel a sorosan és párhuzamosan számított átlag az öt-öt modell esetén szinte megegyezik: a legnagyobb eltérés 18 MPa volt a legnagyobb térfogati hányadú modelleknél, s ez az átlaguktól való csupán 0,01%-os eltérésnek felel meg. Az ergodikusságból következő számtani közép pedig mindenképpen e határok között helyezkedik el.



6.23. ábra — Az E_z Young-modulus (a), illetve a ν_{xz} és ν_{yz} Poisson-számok (b) térfogati hányadtól való függése 32 voxel élhosszúságú modellek esetén deformációévezérlést alkalmazva. A hibavonalak az öt különböző szerkezeti megvalósulás szórását jelölik. Feltüntetjük a releváns Hashin–Shtrikman- és Willis–Weng-féle határokat is.

Tehát lehetővé vált viszonylag kevés számítással egy jónak tűnő becslést adni a makroszkopikus rugalmas tulajdonságokra. Vizsgáljuk meg, hogy mennyire jó ez a becslés! A jobb pontosság kedvéért most tíz ablak átlagával és szórásával dolgozunk. A 6.24a ábrán tíz átlagablak átlagolásával kapott Young-modulusokat és azok szórását tüntettük fel különböző ablakméretek esetén. Megfigyelhető, hogy az átlagos értékek változása az ablakméret szerint jóval kisebb, mint egyébként a tíz megvalósulásból származó, átlagos értékhez tartozó szórás. Továbbá az is figyelmet érdemel, hogy már a 25^3 voxeles modell esetén is 1%-on belüli ($E_z = 101,6 \pm 0,5$ GPa) szórást kapunk az átlagablakokra. Ahogyan ezt már az 5.2.7 alfejezetben tárgyaltuk, erre a méretre vonatkozó térfogatihányad-eloszlás aszimmetrikussága miatt ezeket az adatokat nem használjuk a módszerben. Ezek az eredmények azt mutatják, hogy elegendő legalább a geometriailag reprezentatív térfogatnak megfelelő méretű modelleket szimulálni, hogy az anyag rugalmas válaszát megkapjuk. Az ilyen méretű ablakok már rendelkeznek a statisztikus izotrópia tulajdonságával is, azaz mind a Young-modulusok, mind a Poisson-számok a transzverzális irányokban a 2%-os mérési hibán belül egyezők. Megemlítjük, hogy trikvadratikus interpolációs polinomokat alkalmazó végelemekkel néhány modellen megismételve a szimulációt kb. 1 GPa-lal kisebb Young-modulust kaptunk valamennyi esetben a trilineáris interpolációhoz képest.

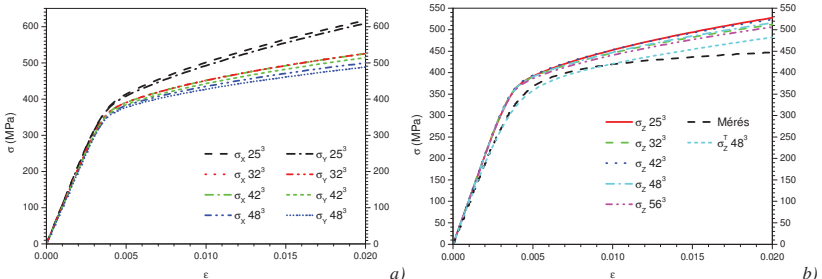
A rugalmas állandók a modellméret növelésével egyre kisebb szórást adtak. Ezzel lehetőség nyílik a reprezentatív térfogatelem szórás alapú (iv) kritériumának alkalmazására. A 6.24b ábrán a Young-modulusok és a Poisson-számok tíz átlagablakra vett relatív szórását ábráztuk. Megfigyelhetjük, hogy mindegyik rugalmas állandó esetén a 2%-os mérési hiba alapján felállított feltétel teljesül a geometriailag reprezentatív térfogat felett.



6.24. ábra — Az átlagos Young-modulusok (a), illetve a Young-modulusok és a Poisson-számok σ relatív szórása (b) különböző L lineáris méretű modellek esetén. A Young-modulus szórását hatványfüggvénnyel közelítve $-1,3$ -es kitevőt kapunk.

6.4.2.4 Képlékeny tulajdonságok

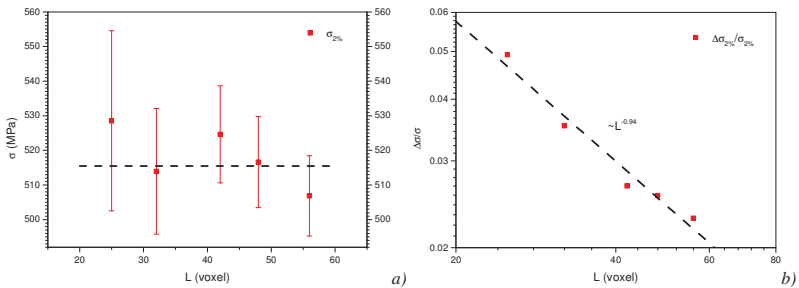
A módszer alapján egy-egy 32^3 , 42^3 és 48^3 méretű modell esetén kapott feszültség–deformáció görbét a 6.25a ábra mutatja. A transzverzális irányokban történő összenyomások a kísérleti 2%-os hibán belül egyező görbéket adnak adott méret esetén. Ismét azt tapasztaljuk, hogy a transzverzális izotrópia érvényesül a geometriailag reprezentatív térfogat felett a nemlineáris anyagi tulajdonságokat tekintve is. A 6.25b ábrán az átlagos alakítási görbéket ábrázoltuk öt különböző átlagablak alapján számítva. Megállapíthatjuk, hogy a különböző átlagos modellgörbék egymáshoz közel futnak, azonban a kísérleti alakítási görbéhez viszonyítva jelentősen túlbecsülnek, ami a termikus belső feszültségek elhanyagolásának következménye. Ha figyelembe vesszük ezeket a belső feszültségeket, akkor körülbelül 7%-os egyezést kapunk a kísérleti görbével 2%-os deformációnál, ami annak fényében, hogy trilineáris interpolációt alkalmaztunk, jó egyezésnek tekinthető. A görbe kezdeti szakaszát ugyanakkor egészen 1%-os deformációig pontosan követi.



6.25. ábra — (a) Különböző méretű, az egyes modellekhez tartozó feszültség–deformáció görbék a transzverzális irányú összenyomáskor. A statisztikus transzverzális izotrópia 2%-on belül teljesül. (b) Az átlagablakokra kapott átlagos feszültség–deformáció görbék különböző modellméretek esetén Z irányú összenyomásra. Az átlagokat öt ablakra számoltuk. A σ_z^T megjelölés a termikus belső feszültségek figyelembevételére utal.

A rugalmas tulajdonságok vizsgálatához hasonlóan az átlagablakokhoz tartozó képlékeny alakításkor a 2%-os deformációhoz tartozó átlagos folyásfeszültségeket a 6.26a ábrán ábrázoljuk a

szórásukkal egyetemben. Ezek az átlagos folyásfeszültségek viszonylag az átlagukhoz közel helyezkednek el, míg szórásuk a modellméret növekedésével a rugalmas tulajdonságokhoz hasonlóan csökken, de a relatív szórás értékét tekintve a rugalmas esethez képest lényegesen nagyobb. Érdeemes megemlíteni, hogy a 2%-hoz tartozó folyásfeszültség is — a rugalmas esethez hasonlóan — követi adott ablakméret esetén a lineáris függést a térfogati hányad szerint. A relatív szórás modellmérettel történő változása a 6.26b ábrán látható módon csökken, a hatványkitevő értékét tekintve lassabban, mint a rugalmas esetben. Ez alapján már számszerűen leolvasható, hogy minden egyes átlagablakméretre 2% fölötti a statisztikus hiba. E csökkenő tendencia figyelembevételével alkalmunk nyílik ismét a reprezentatív térfogatelemre vonatkozó (*iv*) kritériumot alkalmazni, és a képlékeny tulajdonságokra vonatkozó fizikailag reprezentatív térfogatelem méretére becslést adni. Ha a mérési hibát most is 2%-nak vesszük a rugalmas esettel egyezően, akkor körülbelül 60 voxel (114 μm) lineáris méretű átlagablakok esetén juthatunk a hibahatár alá a 6.26b ábra szerint. Az 1%-os hibát azonban csak igen nagy, kb. 125–128 voxel (238–243 μm) lineáris méretű modell esetén érhetnénk el.



6.26. ábra — A 2% deformációhoz tartozó átlagos folyásfeszültségek (a) és relatív szórásuk (b) különböző L átlagablakméret esetén.

6.4.2.5 A módszer alkalmazhatósága

A módszer tehát a szerkezet statisztikus leírására, ezen belül a kétpont-függvényekre és a lokális térfogati hányad eloszlásfüggvényeire épül. Megmutattuk, hogy az effektív tulajdonságok jól becsülhetők a korrelációs hossznál nagyobb lineáris méretű átlagablakok kiválasztása esetén. A módszer alkalmazásának feltétele, hogy a lokális térfogati hányad eloszlásfüggvénye szimmetrikus legyen, valamint a kiválasztott fizikai mennyiség a releváns térfogati hányadok intervallumában közel lineáris változást mutasson. Az előbbi feltétel általában teljesül statisztikusan homogén kompozitok esetén, hiszen a véletlenszerűen kiválasztott, nagyszámú mintavételi ablakok alapján valószínűségi változók összegéről beszélünk, amelyek a centrális határeloszlás-tétel értelmében mindig Gauss-eloszláshoz vezetnek. Az utóbbi feltétel is általában teljesül a vizsgált rugalmas modulusokra és a folyásfeszültségre vonatkoztatva, azzal a megkötéssel, hogy a térfogati hányad releváns intervalluma nem túl széles. A geometriailag reprezentatív térfogattal egyező legkisebb, 32^3 voxeles modellek esetén a legkritikusabb ez a feltétel. Miközben

az eloszlás lényeges részéből vettünk modelleket, az illesztett egyenes regressziója $R = 0,998$ volt (6.23a ábra). Ez a jó illeszkedés kissé meglepő, ha a rugalmas együttthatók határaitra vonatkozó analitikus függvények alakját tekintjük: mind a Hashin–Shtrikman-határok, mind a Willis–Weng-határok nemlineáris függvények. Azonban, ha ezen függvényeket elegendően kis intervallumban vizsgáljuk, például a 32^3 voxeles modell esetén a szükséges $0,17$ szélességű tartományban, akkor mindegyik Young-modulusra vonatkozó határ legalább $R = 0,999$ -es regresszióval egyenessel illeszthető. A görbültebb Hashin–Shtrikman-féle alsó határ esetén is kis térfogati hányadok esetén nagyobb ($f_v = 0,195$ esetén $R = 0,9993$), míg a nagyobb térfogati hányadok esetére valamivel kisebb ($f_v = 0,895$ esetén $R = 0,9965$) regressziót kapunk. Ez azt mutatja, hogy általában részecskeerősítésű kompozitok esetén az átlagablak módszer jól használható. Annál jobb az egyenessel való közelítés, minél nagyobb a modellezéshez kiválasztott térfogat.

A 6.24a és 6.26a ábrán lényegében a kompozit effektív tulajdonságaira vonatkozó becsléseket láthatunk. Annak ellenére, hogy az átlagablakokra kapott modelleredmények szórása viszonylag nagy, az átlagokból kapott becslések egymáshoz képest közeliek. Az effektív értékek relatív szórása az ablakméret függvényében közel hatványfüggvény szerint csökken (6.24b és 6.26b ábra). Felvetődik, hogy a szerkezeti durvasággal jellemezhető, a mikroszerkezetben jelenlévő geometriai „zaj” hogyan befolyásolja a lineáris és nemlineáris anyagi válasz „zaját”. Az ábrákon jelölt kitevők alapján mondhatjuk, hogy a folyásfeszültség szórása jóval lassabban csökken ($-0,94 \pm 0,15$ kitevővel), mint a rugalmas állandóké, amelyet az anyag nemlineáris viselkedésének tulajdoníthatunk. A Young-modulus szórásához tartozó kitevő kb. $-1,3 \pm 0,2$, amely egyezően tekinthető a szerkezeti durvaság $-1,43$ -os kitevőjével (5.12b ábra), ezáltal jelezve, hogy a geometriai „zaj” elhanyagolható hatású e lineáris tulajdonság „zajára” nézve.

Az eddigieknek megfelelően 2%-os hibát tekintve, megállapíthatjuk, hogy a mikroszerkezetre jellemző korrelációs hosszal megegyező lineáris méretű (32^3 voxeles) modellek már statisztikus értelemben reprezentatívnak tekinthetők a lineáris tulajdonságok leírására. Azonban a képlékeny tulajdonságok esetén már ennek a méretnek a kétszerese szükséges. Első látásra meglepőnek tűnhet, hogy már a geometriailag reprezentatív térfogat is jó becslést ad a rugalmas tulajdonságokra, azonban a 2.4.2 alfejezetben tárgyalt Drugan- és Willis-féle, gömbmodellekre vonatkozó elméleti eredmények szerint már hihetővé válik. A Young-modulus esetén kapott 1,8-szeres arány a gömbátmérő és a reprezentatív térfogatelem mérete között jó egyezést mutat a véletlen gömbmodellekre kapott úgynevezett rövid korrelációs hosszal [22]; ennél a távolságnál a kétpont-korrelációs függvény oszcillációja kicsivé válik, és a rendszer korrelációja ezen túl elhanyagolható. A legkisebb átlagablak esetére meghatározva ezt az arányt a sajtolás irányában vett átlagos ellipszoidméret esetén kb. 2,8-et, míg az ekvivalens gömbátmérővel számolva kb. 4,7-et kapunk, míg a képlékeny tulajdonságokra is már elég pontos

becslést adó modellméret (60 voxel) esetén ugyanezekre az értékekre 5,2 és 8,8 adódik. Levonhatjuk tehát azt a következtetést, hogy a közvetlen modellezés esetén optimális az átlagablakok kiválasztása, mert ekkor a 6.4.1 alfejezetben tárgyalt modellezési stratégia 6–7-szeres faktorához képest most lényegesen kisebb szorzót kaptunk a rugalmas, míg közel megegyezőt a képlékeny tulajdonságokra.

A modellezési és a kísérleti eredmények összehasonlításával azt láthatjuk, hogy az egyszerű lineáris interpolációt alkalmazó végelemek felhasználásával kapott Young-modulusra kapott eredmények kb. 3%-on belül jó közelítést adnak, azonban a folyásfeszültségre 2%-os deformációnál már kb. 7% az eltérés. A rugalmas tulajdonságok esetén magyarázható az eltérés az alacsony fokú interpolációs függvény használatával, valamint a kiinduló anyagi paraméterek pontatlanságával. A képlékeny tulajdonságok esetén feltűnő a nagyobb becsült alakítási keményedés, amely az alkalmazott képlékenységi modellnek köszönhető, feltéve, hogy a mikroszerkezet kellő felbontással ismert, és az ebből eredő sarkos felületek nem játszanak lényeges szerepet. Ez utóbbi feltételezést megerősíti az a tapasztalat, amelyet az egyrészecskés egységcellamodellek esetén sima felületű ellipszoidrészecskék modellezésekor kaptunk, miszerint az alakítási keményedés hasonlóan nagy. A mérések során kapott kisebb alakítási keményedés magyarázható lenne az összenyomási alakítás során bekövetkező anyagkárosodással, azonban a tomografikus vizsgálatok során ezt a hatást nem lehetett kimutatni.

6.4.3 Konklúziók a közvetlen módszerekre vonatkozóan

A tomografikus rekonstrukcióból kapott háromdimenziós mikroszerkezeti térképre építhető közvetlen modellezési stratégiák során arra a fő következtetésre jutottunk, hogy ezen modellek esetén is a statisztikus módszereken — főként az egyrészecskés egységcellamodelleken — alapuló módszerekhez hasonló becsléseket adhatunk, azonban a közvetlen modellek minőségileg különböznek ezektől. Jobban figyelembe veszik az egyes szemcsék közötti kölcsönhatásokat, általánosabb — azaz nem egy-egy adott tulajdonságra specifikus — anyagi választ is megkaphatunk belőlük, az elvárt transzverzális szimmetriát jól mutatják, a reprezentatív térfogatelem méretére megbízható becslési lehetőséget adnak, ugyanakkor viszonylag kis reprezentatív térfogatot adnak.

Rámutattunk arra, hogy viszonylag széles körben alkalmazható az átlagablakmódszer, mivel a szükséges feltételei általában jó közelítéssel teljesülnek. Továbbá arra, hogy optimális modellezést valósít meg abban az értelemben, hogy a lehető legkevesebb számítási erőforrás felhasználásával is már kellően általános érvényű, és mindemellett viszonylag gyors eredményre vezető módszert valósít meg. Pontosságában közelíti az általános ellipszoidrészecskével közelítő egységcellás modellt, azonban kiküszöböli azt a hátrányát, hogy csak egy adott tulajdonság becslésére szorítkozik, ezzel jól visszadja egy modellen belül is a makroszkopikus anyagon tapasztalt tulajdonságok közötti kapcsolatokat.

Az átlagablakmódszer kiemelkedik az egyszerű térfogati lefedésen alapuló közvetlen modellhez képest kisebb szükséges modellmérete és kevesebb létrehozott modellszám, azaz összességében kisebb számításiigénye révén. Optimálisabb megközelítése lehetőséget ad a képlékeny tulajdonságok széleskörű vizsgálatára is.

Ezen modellek vizsgálatával ellenőrizni lehetett az idealizált modellrendszereken számított, rugalmas tulajdonságokra vonatkozó elméleti becslések eredményei és a valódi szerkezetre kapható becslések összhangját. Láthattuk, hogy az izotróp kétponthatárok is már jó közelítést adnak, de az anizotróp határok jól visszaadják a valódi szerkezeten is tapasztalt irány szerinti függőséget. Továbbá láttuk, hogy az izotróp háromponthatárok már túlságosan szűk becslést adnak a sokkal erősebb szerkezeti függőség miatt ahhoz, hogy egy transzverzálisan izotrópnak tekinthető valódi szerkezetre használható becslést adjon.

7 Összefoglalás

Az értekezésben részecskeerősítésű fémmátrixú kompozitok mechanikai modellezésének lehetőségeit tárgyaltuk konkrét AA6061 ötvözet alapú 20%-ban Al_2O_3 kerámiarészecskéket tartalmazó valódi anyag háromdimenziós röntgen-holotomográfiával előállított mikroszerkezeti térképe alapján. Elsősorban a legelterjedtebb anyagvizsgálati módszer, az egytengelyű összenyomás mechanikai szimulációját tűztük ki célul, ugyanis ekkor ismeretes, hogy kismértékű (kb. 2%-os) képlékeny alakítás hatására a kompozit még nem károsodik. A valódi mikroszerkezet ismeretében lehetőség nyílt a mikroszerkezeti tulajdonságok részletes statisztikus elemzésére.

A szerkezetanalízis főbb eredményeként adódtak a részecskék átlagos méretének különböző közelítési szempontok szerinti jellemzése, a részecskék alakjának alakfaktoral, valamint karcsúsággal történő leírása. A részecskét közvetlenül övező lokális környezet statisztikus jellemzését tette lehetővé az úgynevezett lokális térfogatokon végzett részletes elemzés. A kompozitszerkezetet egészében is jellemző statisztikus leírást adtunk a kétpont-valószínűségi függvények meghatározásával. Ezek alapján a különböző kritériumok szerinti korrelációs hosszakra következtettünk. A korrelációs hosszak meghatározása elengedhetetlen a geometriailag reprezentatív térfogat méretének meghatározásához. A szerkezeti változatosságot jellemző szerkezeti durvaság kiértékelésével a szerkezet ergodikusságának pontosságát jellemezhetjük. Többféle analízis során is megmutatkozott a kompozit előállításának módjából fakadó a sajtolási irányra merőleges transzverzális irányokban tapasztalható szerkezeti izotrópia, amely a fizikai tulajdonságokban is tükröződött.

A céltudatos és — a könnyen előforduló téves következtetéseket elkerülendő — kellő odafigyeléssel végzett szerkezetanalízis eredményeire támaszkodva már statisztikusan megalapozott számítógépes végeselemmodelleket építhetünk fel, amelyeket elsődlegesen abból a célból konstruáltunk, hogy az egyébként kivitelezhetetlen számításgényt lecsökkentve, viszonylag gyors eredményre vezető anyagmodelleket kapjunk. Ezen anyagmodellek sajátosságait kielemezve a következő eredményekre jutottunk.

A lokális szerkezet finom részleteinek elfedésén alapuló átlagolásiablak-módszerrel az egész rekonstruált, a reprezentatív térfogat méreténél jóval nagyobb térfogatot modelleztük. Ezzel a modellel tehát a részecskék egymáshoz képesti elhelyezkedését viszonylag jól, míg a részecskék pontos alakját kevésbé közelítjük pontosan. Mivel ez a módszer extrapolációs modellezési stratégiát követ, viszonylag nagy modellezésből fakadó hibát vártunk, azonban meglepően jó közelítést kaptunk. Megállapítottuk, hogy a részecskék egymáshoz képesti elhelyezkedése elsősorban az alakítási keményedést befolyásolja.

Ellentétes irányból közelítve a lokális részecskekörnyezet statisztikus tulajdonságai alapján, elsősorban az alakú anizotrópia figyelembevételével egyrészecskés egységcellamodelleket

építettünk, amelyek térfogati részesedés szerinti eloszlásfüggvény szerinti súlyozott összegzésével következettünk a valódi anyag viselkedésére. Az elsődleges elemzési paraméter a lokális térfogatok térfogati hányada volt. Már itt felfigyelhettünk arra, hogy a közel Gauss-eloszlást követő eloszlásfüggvény szerinti összegzés nem adott jobb eredményt, mint az eloszlásfüggvény szerinti átlagos egységcellamodell. A modell igen jó közelítést adott a valódi anyag képlékeny alakítási görbéjére, azonban ki kell emelnünk azt a hiányosságát, hogy a modellt csak igen behatároltan alkalmazhatjuk univerzálisan a mechanikai tulajdonságok becslésére, továbbá a szerkezet transzverzális izotrópiáját sem adja vissza. Az átlagos egységcellamodell további javításaként figyelembe vettük a lokális térfogatban a részecskék középpontból való eltolódásának és elfordulásának eloszlásfüggvényeit is, lényeges javulást azonban nem okozott az eredményekben. Megállapítottuk, hogy a térfogati hányad az elsődlegesen meghatározó fontosságú anyagi paraméter a mechanikai tulajdonságok vizsgálatához. Ezen túlmenően a részecskék alakja is fontos geometriai paraméter, viszont az effektív anyagmodellek szempontjából a részecskék pontos alakja nem számottevő csak a részecskék körvonalának közelítő alakja lényeges. Továbbá a részecskék és az őket körülvevő lokális mátrixkörnyezet átlagos karcsúsági viszonyainak figyelembevétele kiemelten szükséges. A részecskék pontosabb alak leírása a képlékeny alakítási görbe kezdeti, könyökpont környéki szakaszának becslését javítja.

Az egységcellamodellek eredményeire épülő multiskálamodellekkel megkíséreltük az egyes lokális modellek mechanikai kölcsönhatását közelíteni ismét a térfogati reprezentáltságot jellemző statisztikus eloszlásfüggvények alapján, a valóságtól nem teljesen idegen feltételezéssel, miszerint véletlenszerűen kerültek egymás mellé a különböző modellek. Meglepő volt, hogy az előbbieken említett átlagos egységcellamodellhez képest nem adott lényegesen jobb eredményt ez a közelítés sem, viszont a reprezentatív térfogatelem nagyságára irányuló konkrét becslés itt jelent meg aszerint, hogy mekkora méretű modellek esetén nem számít már a véletlenszerű felépítés megvalósítása.

A reprezentativitás kérdése csak a háromdimenziós mikroszerkezetre közvetlenül épülő modelleknél jelent meg megoldandó problémaként. A rekonstruált szerkezet kisméretű modellekkel történő térfogati lefedésre épülő közvetlen modellek esetén viszonylag nagy reprezentatív modellméret adódott. Azonban optimálisan kiválasztva a szerkezeti változatosság felmérésekor a különböző mintavételi ablakméretre kapott, a lokális térfogati hányad eloszlásfüggvényének átlaga alapján definiálható, úgynevezett átlagablakok esetén már jóval kisebb méretű reprezentatív térfogatot kaptunk. Néhány legalább ekkora átlagablak mechanikai választást átlagolva már igen jó becsléseket adhatunk a kompozit mind rugalmas, mind képlékeny tulajdonságaira. Megállapítottuk, hogy a lineáris tulajdonságok becsléséhez elegendő a geometriailag reprezentatív térfogatelemnek megfelelő nagyságú átlagablakokat modellezni, míg az általunk vizsgált kompozit nemlineáris anyagi választásának vizsgálatához már a körülbelül

kétszer nagyobb lineáris méretű, azaz nyolcszor nagyobb térfogatú átlagablakokat kell modelleznünk a kb. 2% mérési hibának megfelelő modellezési pontosság eléréséhez. Ez azt jelenti, hogy rugalmas tulajdonságok esetén a modellezendő térfogat lineáris méretének az átlagos részecskeméret legalább 3-szorosának, míg képlékeny tulajdonságok esetén 5–6-szorosának kell lenni.

Az elméleti modellekkel való összehasonlítások során megállapítottuk, hogy az izotróp Hashin–Shtrikman-féle kétponthatárok a Voigt- és Reuss-féle rugalmassági határoknál lényegesen szűkebbek, és viszonylag jó közelítést adnak a rugalmas együtthatókra a különböző térfogati hányadú modellek esetén. A Beran–Molyneux–Milton-féle izotróp háromponthatárok azonban már nem közelítik jól a gyengén anizotróp szerkezetet. A transzverzális izotrópiát figyelembe vevő Willis–Weng-féle anizotróp határok azonban már jól közelítik a különböző irányokban tapasztalható rugalmas együtthatókat a konkrét modellszerkezet esetén. Így ez utóbbi analitikus becslést hatékonyan lehet használni a vizsgált kompozitokhoz hasonlóan statisztikusan transzverzális izotrópiát mutató szerkezetek esetén.

Összességében kimondhatjuk, hogy alkalmas modellezési stratégia megválasztásával a háromdimenziós mikroszerkezet ismeretében kiváló becsléseket adhatunk a mechanikai tulajdonságokra, olyan végeselemmodelleket építhetünk, amelyek jól visszaadják az anyagi deformációra adott válaszát. A transzverzális szerkezeti izotrópia kézenfekvő lehetőséget adott a modellek megbízhatóságának, illetve pontosságának becslésében. Mind a rugalmas tulajdonságokat, mind a képlékeny tulajdonságokat kontinuummechanikai módszerekkel jól tudtuk becsülni, a képlékeny alakítási görbét 1–1,5%-os deformációig kiválóan tudtuk közelíteni, ezen deformációértéken túl a modellek nagyobb alakítási keményedést szolgáltatottak, mint az a mérések során adódott. Ez a jelenség a jövőben további részletes vizsgálat tárgyát képezheti.

8 Köszönetnyilvánítás

Az értekezés létrejöttéhez anyagi támogatást adott a Volkswagen-Stiftung (I/76 900) és az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (T-043247).

A tomográfiai mérésekben közreműködtek, segítséget nyújtottak, és tanácsot adtak a European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) ID19-es mérőállomásának munkatársai.

A téma támogatásában, minták előállításában nyújtott nélkülözhetetlen segítséget Horst Biermann (Technische Universität Bergakademie, Freiberg, Institut für Werkstofftechnik).

Az egységcellás modellek számításában nyújtott segítséget szakdolgozóként Axel Klohn (Universität der Bundeswehr, München, Institut für Werkstoffkunde).

Ezúton köszönjük a segítségüket és támogatásukat.

A doktori munka során nyújtott támogatásért, tanácsokért és kritikus észrevételekért köszönetet mondunk az Eötvös Loránd Tudományegyetem egykori Általános Fizika Tanszéke, jelenlegi Anyagfizikai Tanszéke valamennyi munkatársának.

Kitüntetett köszönet illeti Rajkovits Zsuzsannát a szerző hosszú éveken át tartó feltétlen támogatásáért, amely biztatás nélkül a szerző nem került volna az anyagtudomány területére, és a Tanszék kollegiális közösségébe.

A szerző külön köszönetet mond témavezetőinek, Borbély Andrásnak és Lendvai Jánosnak rendkívül hasznos tudományos és praktikus tanácsaikért, a tudományos munka elvégzésében, tudományos előadásokon való bemutatásában és tudományos közleményekben való megjelenítésében, valamint e doktori értekezés elkészítésében nyújtott nélkülözhetetlen segítségükért.

9 Függelék

9.1 Variációs elvek és rugalmassági határok

Az alábbiakban röviden ismertetjük a kompozitok rugalmas tulajdonságainak elméleti vizsgálatához gyakran használt variációs elveket, amelyeket Hashin és Shtrikman vezetett be [31], majd Walpole újra levezetett. Később Willis általánosította ezeket az elméleteket [34], [48], [98]. (A leírásokban megtartottuk a szerzők eredeti koncepcióit, bár léteznek egységes, modern formalizmusban tárgyalt változatok is. Ezek tekintetében az irodalomra utalunk [22], [99].)

9.1.1 A Hashin-Shtrikman-féle variációs elvek

Először az eredeti Hashin és Shtrikman által kidolgozott variációs elvet írjuk le, amely izotróp fázisokból álló kompozitra vonatkozik, amelyből a „representatív térfogatnál” nagyobb darabot veszünk.

Legyen egy V térfogatú, S felületű homogén, izotróp anyagú, deformált rugalmas testben az ismert deformációs és feszültségtér $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ és $\boldsymbol{\sigma}^0$! Feltesszük, hogy nincsenek térfogati erők. Az általánosított Hook-törvény

$$(224) \quad \boldsymbol{\sigma}^0 = L_0 \boldsymbol{\varepsilon}^0$$

alakban írható, ahol L_0 a rugalmassági együtthatók negyedrendű tenzora, amely konstans az egész anyagban, továbbá az $\boldsymbol{\varepsilon}^0$ deformációt az \mathbf{u}^0 elmozdulástérrel az

$$(225) \quad \varepsilon_{ij}^0 = \frac{u_{i,j}^0 + u_{j,i}^0}{2}$$

alakban fejezhetjük ki, ahol a vessző deriválást jelöl.

Most változtassuk a test egy részét más rugalmassági modulusokkal rendelkező anyagokká, miközben a felületen az $\mathbf{u}^0(S)$ elmozdulásokat rögzítjük! Ebben az újonnan létrejött testben keletkező feszültség- és deformációs tereket jelölje rendre $\boldsymbol{\sigma}$ és $\boldsymbol{\varepsilon}$. Defináljuk az Eshelby által bevezetett [42] és Kröner által az elektrosztatikai polarizációvektor mintájára elnevezett [100] $\boldsymbol{\tau}$ feszültségpolarizációs tenzort a

$$(226) \quad \boldsymbol{\sigma} = L_0 \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\tau}$$

kifejezéssel, ahol az L_0 a (224) egyenletből származik! Definíálhatjuk továbbá a két eset közötti különbséget jellemző

$$(227) \quad \mathbf{u}' = \mathbf{u} - \mathbf{u}^0$$

elmozdulásteret, és az ebből következő

$$(228) \quad \boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^0$$

deformációs teret. Ha az $\boldsymbol{\varepsilon}'$ és $\boldsymbol{\tau}$ tereket ismerjük, akkor (228) és (226) alapján $\boldsymbol{\sigma}$ és $\boldsymbol{\varepsilon}$ is meghatározható, ezért ezekre fogjuk a variációs elveket alkalmazni. Az anyag egyensúlyát leíró

$$(229) \quad \nabla L_0 \boldsymbol{\varepsilon}' + \nabla \boldsymbol{\tau} = 0$$

egyenlet és a

$$(230) \quad \mathbf{u}'(S) = 0$$

peremfeltétel mellett felírható

$$(231) \quad U_p = \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\sigma}_0 \boldsymbol{\varepsilon}_0 dV - \frac{1}{2} \int_V (\boldsymbol{\tau}(L - L_0)^{-1} \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\varepsilon}' - 2\boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\varepsilon}_0) dV$$

térfogati integrál akkor veszi fel szélsőértékét, ha

$$(232) \quad \boldsymbol{\tau} = (L - L_0) \boldsymbol{\varepsilon}$$

teljesül. Ha az izotróp anyagok esetén használatos Lamé-állandókkal

$$(233) \quad \boldsymbol{\sigma}^0 = L_0 \boldsymbol{\varepsilon}^0 = \lambda_0 \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}^0) \mathbf{I} + 2G_0 \boldsymbol{\varepsilon}^0,$$

$$(234) \quad L \boldsymbol{\varepsilon} = \lambda \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} + 2G \boldsymbol{\varepsilon}$$

alakban fejezzük ki a rugalmassági tenzorokat, akkor U_p szélsőértéke abszolút maximum, ha $\lambda > \lambda_0$ és $G > G_0$, valamint abszolút minimum, ha $\lambda < \lambda_0$ és $G < G_0$. Továbbá U_p szélsőértéke megegyezik a megváltoztatott anyag deformációs energiájával. Érdeemes megjegyezni, hogy szélsőséges esetekben, ha a λ_0 és G_0 végtelenül nagyok, akkor az itt megfogalmazott variációs elv a potenciális energia, míg ha nagyon kicsik, akkor pedig a komplementer energia minimumának elvéhez tart. (Ezt a számítást hasonló módon, de a deformációpolarizációs tenzor bevezetésével a térfogat felületén ható erők előírásának esetére is végig lehet vinni.)

9.1.2 A Walpole-féle megközelítés

A Hashin–Shtrikman-féle korlátokat az effektív modulusokra Walpole más megközelítésben, közvetlenül a potenciális energia és a komplementer energia minimumának elve alapján határozta meg. Az általa közölt számítás általánosabban írja le a módszert, ugyanis nem feltételezi, hogy az anyag izotróp. Ennek elvét ismertetjük röviden [37].

Először határozzuk meg az effektív modulus fogalmát! Tekintve egy V anyagi térfogatot, amely akár heterogén is lehet, de mindenképp elég nagy ahhoz, hogy reprezentatívnek tekinthető legyen, azaz átlagosan jellemezze a kompozitot. Ez azt is jelenti, hogy elég nagy ahhoz, hogy az anyagra átlagosan jellemző effektív modulus független legyen az anyag felületén előírt erőkől illetve elmozdulásoktól. Tehát az anyag felületén az átlagos érték körül fluktuáló erők és elmozdulások hullámhossza kicsi a reprezentatív térfogat méreteihez képest, és a reprezentatív térfogatra való átlagoláskor elhanyagolható a járulékok. Eszerint, ha ebben a térfogatban az átlagos feszültség $\boldsymbol{\sigma}$ és az átlagos deformáció $\boldsymbol{\varepsilon}$, akkor az általánosított Hook-törvény szerint definiálhatjuk az L effektív rugalmassági tenzort

$$(235) \quad \boldsymbol{\sigma} = L\boldsymbol{\varepsilon},$$

és a rugalmas energiát felírhatjuk az

$$(236) \quad E = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\varepsilon} V = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} L \boldsymbol{\varepsilon} V = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} M \boldsymbol{\sigma} V$$

alakokban, ahol $M = L^{-1}$. A feladat most az, hogy határozzunk meg korlátokat az effektív modulusok tenzorára.

Tekintsünk egy V térfogatú anyagot, amely n különböző homogén fázisból áll, legyen az r . fázis térfogata V_r , rugalmasági tenzora L_r , amelynek inverze M_r , és ezek a tenzorok szimmetrikusak és pozitív definiték. Most vezessük be az úgynevezett viszonyítási anyagot, amellyel kényelmesen kezelhető a probléma! A viszonyítási anyag homogén, rugalmassági tenzora legyen L_0 , inverze M_0 , és ezek is szimmetrikusak és pozitív definiték!

Most vizsgáljuk azt a peremérték-problémát, amikor a kiszemelt anyag felületén előírjuk az elmozdulásokat! Ha a kompozit anyagot kicseréljük a homogén viszonyítási anyagra, akkor abban $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ deformáció keletkezik és $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = L_0 \boldsymbol{\varepsilon}_0 + \boldsymbol{\tau}$ egyensúlyi feszültség ébred. Az így definiált $\boldsymbol{\tau}$ mennyiséget polarizációs feszültség tenzornak nevezzük, és azt a szemléletes jelentést rendelhetjük hozzá, hogy mintha bizonyos helyeken térfogati erők lennének jelen a viszonyítási anyagban. Ha a $\boldsymbol{\tau}$ pontosan az $(L_r - L_0) \boldsymbol{\varepsilon}_0$ értéket veszi fel a V_r térfogaton belül, akkor $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ és $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ pontosan megegyeznek a kompozit anyag kiszemelt térfogatában lévő valódi feszültség- és deformációs térrel, egyéb esetben a $\boldsymbol{\tau}$ által generált $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ és $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ csak közelíteni fogja a valódi feszültség- és deformációs teret.

Analog módon vizsgáljuk meg a másik típusú peremérték-problémát, amikor az anyag felületén a ható erőket írjuk elő! Ha most a kompozitot kicseréljük a viszonyítási anyagra, akkor abban olyan $\boldsymbol{\sigma}_0$ feszültség jön létre, amely egyensúlyt tart a felületen előírt erőkkel, és ennek hatására az anyagban $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = M_0 \boldsymbol{\sigma}_0 - \boldsymbol{\eta}$ deformációs tér keletkezik. Az így definiált $\boldsymbol{\eta}$ polarizációs deformációtenzorra szemléletesen úgy gondolhatunk, hogy a $-\boldsymbol{\eta}$ a külső feszültegtől mentes anyagban lévő deformációs teret jelenti. Ha az $\boldsymbol{\eta}$ pontosan az $(M_0 - M_r) \boldsymbol{\sigma}_0$ értéket veszi fel a V_r térfogaton belül, akkor $\boldsymbol{\sigma}_0$ és $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ pontosan megegyeznek a kompozit anyag kiszemelt térfogatában lévő valódi feszültség- és deformációs térrel, egyébként pedig csak közelíti azt.

Ha ezen megfontolások után most úgy állítjuk elő a közelítő tereket, hogy a polarizációkat alkalmasan választjuk meg, akkor a klasszikus minimumelveket kihasználva határokat adhatunk a teljes deformációs energiára, és így az effektív modulusokra is. Csak az anyagdarabonként homogén polarizációs terek tűnnek a legáltalánosabbnak, amelyekkel kiszámíthatjuk a szükséges átlagokat a rendelkezésünkre álló információk (a fázisok térfogati hányada és modulusaik) birtokában. A legpontosabb, anyagdarabonként homogén közelítő tereket megkaphatjuk a valódi

polarizációkból csak az $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ és $\boldsymbol{\sigma}_0$ közelítő terek V_r -en vett átlagának járulékat megtartva. Tehát a V_r térfogatban eszerint definiált legjobb polarizációs terek

$$(237) \quad \boldsymbol{\tau} = (L_r - L_0)\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r,$$

és

$$(238) \quad \boldsymbol{\eta} = (M_0 - M_r)\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r,$$

ahol $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r$ és $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r$ az $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ és $\boldsymbol{\sigma}_0$ terek V_r térfogatban vett átlaga. Ebből következően a V_r térfogatban a közelítő terek a következő módon alakulnak

$$(239) \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}} = L_0\boldsymbol{\varepsilon}_0 + \boldsymbol{\tau} = L_0\boldsymbol{\varepsilon}_0 + (L_r - L_0)\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r = L_r\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r + L_0(\boldsymbol{\varepsilon}_0 - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r) = L_r\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r + L_0\boldsymbol{\varepsilon}'_r,$$

$$(240) \quad \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = M_0\boldsymbol{\sigma}_0 - \boldsymbol{\eta} = M_0\boldsymbol{\sigma}_0 - (M_0 - M_r)\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r = M_r\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r + M_0(\boldsymbol{\sigma}_0 - \bar{\boldsymbol{\sigma}}_r) = M_r\bar{\boldsymbol{\sigma}}_r + M_0\boldsymbol{\sigma}'_r,$$

ahol bevezítettük az $\boldsymbol{\varepsilon}'_r = \boldsymbol{\varepsilon}_0 - \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r$ deformációt és a $\boldsymbol{\sigma}'_r = \boldsymbol{\sigma}_0 - \bar{\boldsymbol{\sigma}}_r$ feszültséget, amelyek a közelítő deformációs és feszültségterek V_r térfogatban vett átlagának valódi tértől való eltérését jellemzik.

Ismét az első határérték-problémát vizsgálva legyenek a kiszemelt kompozit térfogat felületén előírt elmozdulások olyanok, hogy megfeleljenek egy $\boldsymbol{\varepsilon}$ homogén deformációnak, amely következésképpen az egész anyagra kiterjedő átlagos deformációt is jelenti, ekkor a rugalmas energia legyen E . Így az $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ deformáció a felületi elmozdulásokból folytonos elmozdulásteren keresztül származtatható, és így $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ egy egyensúlyi feszültségteret ad. Ekkor a térfogatban rejlő E rugalmas energiára közvetlenül a potenciális energia minimumának elvéből, valamint a komplementer energia (szokás még feszültségenergiának is nevezni) minimumának elvéből rendre a

$$(241) \quad E \leq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int \boldsymbol{\varepsilon}_0 L_r \boldsymbol{\varepsilon}_0 dV_r,$$

és

$$(242) \quad E \geq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int \hat{\boldsymbol{\sigma}} (2\boldsymbol{\varepsilon} - M_r \hat{\boldsymbol{\sigma}}) dV_r,$$

egyenlőtlenségeket kapjuk. A virtuális munkára vonatkozó

$$(243) \quad \int_V \hat{\boldsymbol{\sigma}} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0) dV = 0$$

egyenlőség bal oldalát a (241) egyenlőtlenséghez hozzáadva, illetve a (242) egyenlőtlenségből kivonva, majd a (239) összefüggést felhasználva az egyenlőtlenségek a

$$(244) \quad E \leq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n V_r \boldsymbol{\varepsilon} L_r \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r - \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int \boldsymbol{\varepsilon}'_r (L_0 - L_r) \boldsymbol{\varepsilon}'_r dV_r$$

$$(245) \quad E \geq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n V_r \boldsymbol{\varepsilon} L_r \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_r + \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int \boldsymbol{\varepsilon}'_r L_0 (M_0 - M_r) L_0 \boldsymbol{\varepsilon}'_r dV_r$$

alakot veszik fel.

Most ugyanezt a gondolatmenetet analóg módon végigszámítva a másik peremérték-problémára, ahol most a felületen az erőket írjuk elő oly módon, hogy megfeleljenek egy σ homogén feszültségérnek, amely egyben a teljes anyagra vonatkozó átlagos feszültség is. A kialakuló σ_0 feszültségtér egyensúlyban van a külső erőekkel, és így az $\hat{\varepsilon}$ deformációs tér is folytonos elmozdulástérből származtatható. A potenciális és a komplementer energia minimumának elvéből azonnal következnek rendre a

$$(246) \quad E \geq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int_{V_r} \hat{\varepsilon} (2\sigma - L_r \hat{\varepsilon}) dV_r,$$

$$(247) \quad E \leq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int_{V_r} \sigma_0 M_r \sigma_0 dV_r$$

egyenlőtlenségek. A virtuális munkára vonatkozó

$$(248) \quad \int_V (\sigma - \sigma_0) \hat{\varepsilon} dV = 0$$

egyenlőség előzőhöz hasonló felhasználásával, és a (240) segítségével a (244) és (245) egyenlőtlenségek duálisához jutunk:

$$(249) \quad E \geq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n V_r \sigma M_r \bar{\sigma}_r + \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int_{V_r} \sigma'_r M_0 (L_0 - L_r) M_0 \sigma'_r dV_r,$$

$$(250) \quad E \leq \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n V_r \sigma M_r \bar{\sigma}_r - \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \int_{V_r} \sigma'_r (M_0 - M_r) \sigma'_r dV_r.$$

Végezetül feltételezve, hogy a kiszemelt térfogat reprezentatív, belátható, hogy a (246)-(247) és (249)-(250) egyenlőtlenségek érvényben maradnak akkor is, ha a valódi és a közelítő terek által a felületeken felvett értékek csupán „makroszkopikusan” felelnek meg a homogén tereknek, abban az értelemben, ahogy fentebb az effektív modulus fogalmánál tárgyaltuk. Tehát ekkor (236) adja a teljes térfogatra vonatkozó rugalmas energiát. Definiálhatjuk a közelítő terekhez tartozó A_r deformációkoncentráció-tenzort és B_r feszültségkoncentráció-tenzort

$$(251) \quad \bar{\varepsilon}_r = A_r \varepsilon,$$

$$(252) \quad \bar{\sigma}_r = B_r \sigma,$$

amelyekre teljesül, hogy

$$(253) \quad \sum_{r=1}^n f_r A_r = \sum_{r=1}^n f_r B_r = I,$$

ahol f_r az r fázis térfogati hányada, és I a negyedrendű egységtenzor, amelyet felírhatunk Kronecker-deltákkal:

$$(254) \quad I_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}).$$

Képezzük a rugalmassági tenzorok ezen tenzorokkal súlyozott átlagát:

$$(255) \quad \bar{L} = \sum_{r=1}^n f_r L_r A_r ,$$

$$(256) \quad \bar{M} = \sum_{r=1}^n f_r M_r B_r .$$

Most a (244)-(245) és (249)-(250) egyenlőtlenségekben szereplő integrálokat el akarjuk tüntetni, mivel kiértékelésükhöz több információra lenne szükség, mint ami rendelkezésünkre áll. Így a teljes térfogat energiájának korlátai maradnak csak, amelyek az integranduszban lévő, a viszonyítási anyag alkalmas megválasztásával pozitív definitté tett kvadratikus alakokból kaphatók. Megjegyezzük, hogy $L_0 - L_r$ és $M_r - M_0$ egyszerre pozitív, illetve negatív definitnek, továbbá a σ és ε átlagos terek tetszőlegesen választhatók. Tehát a (244)-(245) és (249)-(250) egyenlőtlenségek alapján az effektív modulus a következő tétélekkel lehet határok közé szorítani:

- Ha $L_0 - L_r$ pozitív (negatív) szemidefinit, akkor $\bar{L} - L$ is pozitív (negatív) szemidefinit.
- Ha $M_0 - M_r$ pozitív (negatív) szemidefinit, akkor $\bar{M} - M$ is pozitív (negatív) szemidefinit.

Ezzel megmutattuk, hogy hogyan lehet az effektív modulusok tenzorára határokat megfogalmazni.

9.1.3 A Willis-féle határok

Röviden ismertetjük a Willis által a kétpontkorrelációs függvények bevezetésével levezetett határok számítási módszerét.

Hozzunk létre a kompozit felületén olyan elmozdulásokat, melyek egy homogén $\bar{\varepsilon}$ deformációnak felelnek meg. A kialakuló σ lokális feszültség és ε lokális deformáció között a szokásos $\sigma = L' \varepsilon$ egyenlet teremt kapcsolatot, ahol L' a lokális rugalmassági modulusok tenzora. A problémát ismét úgy kezeljük, hogy az L_0 rugalmassági modulusú viszonyítási anyagban bevezetjük a τ feszültségpolarizációs tenzort, és létrehozuk az $\bar{\varepsilon}$ deformációt. Ekkor a lokális deformáció

$$(257) \quad \varepsilon = \bar{\varepsilon} - \Gamma \tau$$

alakban írható, ahol $-\Gamma$ lineáris operátor, amely a τ feszültségpolarizációból származtat egy olyan deformációs teret, amely a zérus felületi elmozdulásokhoz és az egyensúlyi $\sigma = L_0 \varepsilon + \tau$ feszültségtérhez tartozik. Ebből az

$$(258) \quad (L' - L_0)^{-1} \tau + \Gamma \tau = \bar{\varepsilon}$$

egyenlethez jutunk, és mivel az $(L' - L_0)^{-1}$ és a Γ operátorok önadjungáltak, ezért (258) ekvivalens a

$$(259) \quad \delta \left\{ \{ \tau, (L' - L_0)^{-1} \tau \} + \{ \tau, \Gamma \tau \} - 2 \{ \tau, \bar{\varepsilon} \} \right\} = 0$$

variációs elvvel, ahol a kapcsos zárójel a benne szereplő két tag szorzatának a térfogati átlagát jelöli. A funkcionál szélsőértéke $2(E_0 - E)$, ahol E az átlagos energiasűrűség és

$$(260) \quad E_0 = \frac{1}{2} \bar{\epsilon} L_0 \bar{\epsilon}.$$

Ebből a

$$(261) \quad 2(E_0 - E) \leq \{\boldsymbol{\tau}, (L' - L_0)^{-1} \boldsymbol{\tau}\} + \{\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{\tau}\} - 2\{\boldsymbol{\tau}, \bar{\boldsymbol{\epsilon}}\},$$

egyenlőtlenség következik, amikor az $L' - L_0$ pozitív definit, és ellenkező irányú reláció, amikor negatív definit. Ezzel eljutottunk a Hashin–Shtrikman-féle variációs elvhez.

Willis ekkor bevezette a kétponteloszlás függvényeket, és az ergodicitási feltételezés alapján a térfogati átlagokat sokaságátlagokkal helyettesítette. A Walpole-féle gondolatmenetnél leírtakhoz hasonlóan az L' rugalmasságimodulus-tenzor ekkor az r . fázisshoz tartozó L_r értékeket veszi fel, amelyekhez homogén $\boldsymbol{\tau}_r$ polarizáció tartozik. Az r . fázis térfogati hányadát f_r -rel jelölve (az $n+1$. fázis mostantól a mátrixot jelenti), a (261) egyenlőtlenség átirható egy hosszú távú renddel nem rendelkező statisztikusan homogén kompozit esetén a

$$(262) \quad \begin{aligned} & 2(E_0 - E) \leq \\ & \leq \sum_{r=1}^{n+1} f_r \boldsymbol{\tau}_r (L_r - L_0)^{-1} \boldsymbol{\tau}_r + \sum_{r=1}^{n+1} \boldsymbol{\tau}_r \sum_{s=1}^{n+1} \int \Gamma_{rs}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') [P_{rs}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - f_r f_s] dV_{\mathbf{x}} \boldsymbol{\tau}_s - 2 \sum_{r=1}^{n+1} f_r \boldsymbol{\tau}_r \bar{\boldsymbol{\epsilon}} \end{aligned}$$

alakba, ahol a $P_{rs}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ kétpontkorrelációs függvény annak a valószínűségét adja meg, hogy az \mathbf{x} és \mathbf{x}' helyen rendre r és s fázist találunk, továbbá a végtelen test G_{ij} Green-függvényével kifejezve

$$(263) \quad \Gamma_{ijkl}^{\infty} = -\frac{1}{2} (G_{ik,jl}(\mathbf{x}) + G_{jk,il}(\mathbf{x}))$$

Megmutatható, hogy ha a korrelációs függvények ellipszoidszimmetriával rendelkeznek, akkor a $\Gamma^{\infty}(\mathbf{x})$ Dirac-deltaszerűen viselkedik, azaz

$$(264) \quad \int \Gamma^{\infty}(\mathbf{x}) P_{rs}(\mathbf{x}) dV = P_0 P_{rs}(0),$$

ahol $P_{rs}(0) = f_r \delta_{rs}$, ha $r = s$, egyébként nulla. A (264) kihasználásával a (262) határok az L effektív rugalmasságimodulus-tenzorra adnak határokat, ha

$$(265) \quad \bar{L} = \sum_{r=1}^{n+1} f_r L_r [I + P_0(L_r - L_0)]^{-1} \left\{ \sum_{s=1}^{n+1} f_s [I + P_0(L_s - L_0)]^{-1} \right\}^{-1},$$

akkor $L - \bar{L}$ pozitív (negatív) szemidefinit, ha $L_r - L_0$ is pozitív (negatív) szemidefinit minden r fázisra. Ezzel megkaptuk a Willis-féle határokat.

9.2 Az átlagablak és az átlagos tulajdonság kapcsolata

Tekintsünk egy tetszőleges, x paramétertől függő $f(x)$ fizikai mennyiséget, amelyet a $w(x)$, adott x_0 -ra szimmetrikus, valószínűségi sűrűségi függvényvel jellemezhetünk! Ennek a mennyiségnek az átlagos értékét az

$$(266) \quad \bar{f} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} w(x)f(x)dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} [w(x_0-x)f(x_0-x) + w(x_0+x)f(x_0+x)]dx$$

kifejezéssel adhatjuk meg, ahol $w(x_0-x) = w(x_0+x)$ teljesül a feltételezett szimmetria miatt, ezért a szögletes zárójelből kiemelhető. Továbbá, ha $f(x)$ lineáris x -ben, akkor az x_0 körül szimmetrikusan fekvő értékek összegére

$$(267) \quad f(x_0-x) + f(x_0+x) = 2f(x_0)$$

adódik. Behelyettesítve (267)-t (266)-ba a konstans $f(x_0)$ az integrálból kiemelhető, és a

$$(268) \quad \bar{f} = f(x_0) \int_{-\infty}^{+\infty} w(x)dx = f(x_0)$$

végeredményre vezet. Tehát a fizikai mennyiség átlaga megegyezik a paraméter várható értékének megfelelő helyen felvett értékével, azaz az átlagablakkal képezhető értékkel.

10 Az értekezés alapjául szolgáló közlemények

- [S1] P. Kenesei, A. Borbély, H. Biermann:
Microstructure based three-dimensional finite element model of a particulate reinforced metal-matrix composite
Material Science and Engineering A **387–389** (2004), pp. 852–856.
- [S2] P. Kenesei, H. Biermann, A. Borbély:
Structure–property relationship in particle reinforced metal–matrix composites based on holotomography
Scripta Materialia **53** (2005), pp. 787–791.
- [S3] P. Kenesei, A. Klohn, H. Biermann, A. Borbély:
Mean field and multiscale modeling of a particle reinforced metal-matrix composite based on microtomographic investigations
Advanced Engineering Materials **8** (2006), pp. 506–510.
- [S4] P. Kenesei, H. Biermann, A. Borbély:
Estimation of Elastic Properties of Particle Reinforced Metal-Matrix Composites Based on Tomographic Images
Advanced Engineering Materials **8** (2006), pp. 500–506.
- [S5] A. Borbély, P. Kenesei, H. Biermann:
Estimation of effective properties of particle reinforced metal-matrix composites from microtomographic reconstructions
Acta Materialia **54** (2006), pp. 2735–2744.

11 Irodalomjegyzék

- [1] A. Evans, C. San Marchi, A. Mortensen: *Metal Matrix Composites in Industry*, (Springer) (2003).
- [2] P. M. Degischer, G. Requena: MMC-Assess Thematic Network, <http://mmc-assess.tuwien.ac.at>.
- [3] E. Orowan: *Symposium on Internal Stress in Metals and Alloys*, London, The Institute of Metals, (1948) p. 451.
- [4] A. Mortensen, C. San Marchi, H. P. Degischer: *Glossary of terms specific to Metal Matrix Composites – MMC Assess Thematic Network*, MMC-Assess Consortium (2000).
- [5] M. F. Ashby: *Materials Selection in Mechanical Design: Third Edition*, (Butterworth-Heinemann) (2005).
- [6] Granta – Material intelligence, <http://www.grantadesign.com/ashbycharts.htm>
- [7] V. M. Kryachek: *Sintered Metals and Alloys, Friction Composites: Traditions and New Solutions (Review)*. II. Composite Materials, *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, **44** (2005), pp. 5–16.
- [8] *Science – Technology* (2006), pp. 120–127.
- [9] M. D. Skibo, D. M. Schuster: *Process for production of metal matrix composites by casting and composite therefrom*, US Patent 4,759,995 (1988).
- [10] M. D. Skibo, D. M. Schuster: *Process for preparation of composite materials containing nonmetallic particles in the metallic matrix, and composite materials made thereby*, US Patent 4,786,467 (1988).
- [11] MatWeb – Material Property Data, <http://www.matweb.com>.
- [12] Y. L. Shen, M. Finot, A. Needleman, S. Suresh: *Effective elastic response of two-phase composites*, *Acta Metall. Mater.* **42** (1994), pp. 77–97.
- [13] A. Borbély, H. Biermann, O. Hartmann: *FE investigation of the effect of particle distribution on the uniaxial stress-strain behaviour of particulate reinforced metal-matrix composites*, *Mater. Sci. Eng. A* **313** (2001), pp. 34–45.
- [14] O. Hartmann: *Doktori értekezés*, Universität Erlangen-Nürnberg, (2002).
- [15] S. Vaucher, O. Beffort: *Bonding and interface formation in Metal Matrix Composites – MMC-Assess Thematic Network*, MMC-Assess Consortium (2000).
- [16] P. Merle: *Thermal Treatments of Age-hardenable Metal Matrix Composites – MMC-Assess Thematic Network*, MMC-Assess Consortium (2000).
- [17] M. J. Hadianfard, Yiu-Wing-Mai, J. C. Healy: *Effect of ceramic reinforcement on the ageing behaviour of an aluminium alloy*, *J. Mat. Sci.* **28** (1993), pp. 3665–3669.

- [18] T. Das, P. R. Munroe, S. Bandyopadhyay: The effect of Al_2O_3 particulates on the precipitation behaviour of 6061 aluminium matrix composites, *J. Mat. Sci.* **31** (1996), pp. 5351–5361.
- [19] C. M. Friend, S. D. Luxton: The effect of δ alumina fibre arrays on the age-hardening of an Al-Mg-Si alloy, *J. Mat. Sci.* **23** (1988), pp. 3173–3180.
- [20] Kovács I.: Szilárdtestek mechanikai tulajdonságai, I. Kontinuum mechanikai leírás (AULA, Budapest) (2001).
- [21] MSC.Marc 2005, MSC.Software Corporation, Santa Ana.
- [22] S. Torquato: Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties, (Springer, New York) (2002).
- [23] A. Borbély, F. F. Csikor, S. Zabler, P. Cloetens, H. Biermann: Three-dimensional characterization of the microstructure of a metal–matrix composite by holotomography, *Mater. Sci. Eng. A* **367** (2004), pp. 40–50.
- [24] B. L. Lu, S. Torquato: Lineal-path function for random heterogeneous materials, *Phys. Rev. A* **45** (1992), pp. 922–929.
- [25] S. Torquato, G. Stell: Microstructure of two-phase random media. I. The n-point probability functions, *J. Chem. Phys.* **77** (1982), pp. 2071–2077.
- [26] A. Guinier, G. Fournet: Small Angle Scattering of X-Rays, (John Wiley and Sons, New York) (1955).
- [27] P. Debye, H. R. Anderson, H. Brumberger: Scattering by an inhomogeneous solid. II. The correlation function and its applications, *J. Appl. Phys.* **28** (1957), pp. 679–683.
- [28] B. L. Lu, S. Torquato: Local volume fraction fluctuations in heterogeneous media, *J. Chem. Phys.* **93** (1990), pp. 3452–3459.
- [29] W. Voigt: Über die Beziehung zwischen den beiden elasticitäts-constanten isotroper Körper, *Ann. Phys.* **38** (1889), pp. 573–587.
- [30] A. Reuss: Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle, *ZAMM* **9** (1929), pp. 49–58.
- [31] Z. Hashin, S. Shtrikman: Study of variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity, *J. Mech. Phys. Solids* **10** (1962), pp. 335–342.
- [32] Z. Hashin, S. Shtrikman: A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials, *J. Mech. Phys. Solids* **11** (1963), pp. 127–140.
- [33] Z. Hashin: The elastic moduli of heterogeneous materials, *J. Appl. Mech. Trans. ASME* **29** (1962), pp. 143–150.
- [34] J. R. Willis: Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites, *J. Mech. Phys. Solids* **25** (1977), pp. 185–202.

-
- [35] M. J. Beran, J. Molyneux: Use of classical variational principles to determine bounds for the effective bulk modulus in heterogeneous media, *Quart. Appl. Math.* **24** (1966), pp. 107–118.
- [36] G. W. Milton: Bounds on the electromagnetic, elastic, and other properties of two-component composites, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981), pp. 542–545.
- [37] L. J. Walpole: On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems—I., *J. Mech. Phys. Solids* **14** (1966), pp. 151–162.
- [38] L. J. Walpole: On bounds for the overall elastic moduli of inhomogeneous systems—II., *J. Mech. Phys. Solids* **14** (1966), pp. 289–301.
- [39] L. J. Walpole: On the overall elastic moduli of composite materials, *J. Mech. Phys. Solids* **17** (1969), pp. 235–251.
- [40] R. Hill: Theory of mechanical properties of fibre-strengthened materials: I. Elastic behaviour, *J. Mech. Phys. Solids* **12** (1964), pp. 199–212.
- [41] R. Hill: Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids* **13** (1965), pp. 89–101.
- [42] J. D. Eshelby: The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems, *Proc. R. Soc. London* **A241** (1957), pp. 376–396.
- [43] S. Federico, A. Grillo, W. Herzog: A transversely isotropic composite with statistical distribution of spheroidal inclusions: a geometrical approach to overall properties, *J. Mech. Phys. Solids* **52** (2004), pp. 2309–2327.
- [44] Z. Hashin: On elastic behaviour of fibre reinforced materials of arbitrary transverse phase geometry, *J. Mech. Phys. Solids* **13** (1965), pp. 119–134.
- [45] G. J. Weng: Explicit Evaluation of Willis' Bounds With Ellipsoidal Inclusions, *Int. J. Engng. Sci.* **30** (1992), pp. 83–92.
- [46] W. J. Drugan, J. R. Willis: A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites, *J. Mech. Phys. Solids* **44** (1996), pp. 497–524.
- [47] C. Huet: Coupled size and boundary-condition effects in viscoelastic heterogeneous and composite bodies, *Mech. Mater.* **31** (1999), pp. 787–829.
- [48] J. R. Willis: Elasticity theory of composites, *Mechanics of Solids: The R. Hill 60th Anniversary Volume* (eds H.G. Hopkins and M. J. Sewell) (1982), pp. 653–686.
- [49] A. A. Gusev: Representative volume element size for elastic composites: A numerical study, *J. Mech. Phys. Solids* **45** (1997), pp. 1449–1459.
- [50] M. Li, S. Ghosh, T. N. Rouns, H. Weiland, O. Richmond, W. Hunt: Serial Sectioning Method in the Construction of 3-D Microstructures for Particle-Reinforced MMCs, *Mater. Charact.* **41** (1998), pp. 81–95.

- [51] M. Li, S. Ghosh, O. Richmond, H. Weiland, T. N. Rouns: Three dimensional characterization and modeling of particle reinforced metal matrix composites: part I: Quantitative description of microstructural morphology, *Mat. Sci. Eng.* **A265** (1999), pp. 153–173.
- [52] R. Pyrz: Quantitative description of the microstructure of composites. Part I: Morphology of unidirectional composite systems, *Compos. Sci. Technol.* **50** (1994), pp. 197–208.
- [53] Y. Estrin, S. Arndt, M. Heilmaier, Y. Bréchet: Deformation behaviour of particle-strengthened alloys: a Voronoi mesh approach, *Acta Mater.* **47** (1999), pp. 595–606.
- [54] P. E. McHugh, R. J. Asaro, C. F. Shih: Computational modeling of metal matrix composite materials—I. Isothermal deformation patterns in ideal microstructures, *Acta Metall. Mater.* **41** (1993), pp. 1461–1476.
- [55] K. Lee, S. Ghosh: A microstructure based numerical method for constitutive modeling of composite and porous materials, *Mat. Sci. Eng.* **A272** (1999), pp. 120–133.
- [56] S. Ghosh, M. Li, S. Moorthy, K. Lee: Microstructural characterization, meso-scale modeling and multiple-scale analysis of discretely reinforced materials, *Mat. Sci. Eng.* **A249** (1998), pp. 62–70.
- [57] M. Li, S. Ghosh, O. Richmond: An experimental–computational approach to the investigation of damage evolution in discontinuously reinforced aluminum matrix composite, *Acta Mater.* **47** (1999), pp. 3515–3532.
- [58] M. Ostoja-Starzewski, H. Ilies: The Cauchy and characteristic boundary value problems of random rigid–perfectly plastic media, *Int. J. Solids Structures* **33** (1996), pp. 1119–1136.
- [59] E. Maire, A. Fazzekas, L. Salvo, R. Dendievel, S. Youssefa, P. Cloetens, J. M. Letang: X-ray tomography applied to the characterization of cellular materials. Related finite element modeling problems, *Compos. Sci. Technol.* **63** (2003), pp. 2431–2443.
- [60] T. Christman, A. Needleman, S. R. Nutt, S. Suresh: On microstructural evolution and micromechanical modelling of deformation of a whisker-reinforced metal-matrix composite, *Mater. Sci. Eng.* **A107** (1989), pp. 49–61.
- [61] R. J. Arsenault, N. Shi, C. R. Feng, L. Wang: Localized deformation of SiC–Al composites, *Mater. Sci. Eng.* **A131** (1991), pp. 55–68.
- [62] M. Dong, S. Schmauder: Modeling of metal matrix composites by a self-consistent embedded cell model, *Acta Mater.* **44** (1996), pp. 2465–2478.
- [63] E. E. Underwood: Quantitative stereology, (Addison-Wesley, Reading, MA) (1970).
- [64] T. Christman, A. Needleman, S. Suresh: An experimental and numerical study of deformation in metal-ceramic composites, *Acta Metall.* **37** (1989), pp. 3029–3050.
- [65] S. F. Corbin, D. S. Wilkinson: The influence of particle distribution on the mechanical response of a particulate metal matrix composite, *Acta Metall. Mater.* **42** (1994), pp. 1311–1318.

- [66] P. B. Prangnell, S. J. Barnes, S. M. Roberts, P. J. Withers: The effect of particle distribution on damage formation in particulate reinforced metal matrix composites deformed in compression, *Mat. Sci. Eng.* **A220** (1996), pp. 41–56.
- [67] R. Estevez, E. Maire, P. Franciosi, D. S. Wilkinson: Effect of particle clustering on the strengthening versus damage rivalry in particulate reinforced elastic plastic materials: A 3-D analysis from a self-consistent modelling, *Eur. J. Mech. A/Solids* **18** (1999), pp. 785–804.
- [68] G. L. Povirk, M. G. Stout, M. Bourke, J. A. Goldstone, A. C. Lawson, M. Lovato, S. R. Macewen, S. R. Nutt, A. Needleman: Thermally and mechanically induced residual strains in Al–SiC composites, *Acta Metall. Mater.* **40** (1992), pp. 2391–2412.
- [69] H. J. Böhm; W. Han: Comparisons between three-dimensional and two-dimensional multi-particle unit cell models for particle reinforced metal matrix composites, *Modelling Simul. Mater Sci. Eng.* **9** (2001), pp. 47–65.
- [70] H. J. Böhm, A. Eckschlager, W. Han: Multi-inclusion unit cell models for metal matrix composites with randomly oriented discontinuous reinforcements, *Comp. Mater. Sci.* **25** (2002), pp. 42–53.
- [71] N. Chawla, V. V. Ganesh, B. Wunsch: Three-dimensional (3D) microstructure visualization and finite element modeling of the mechanical behavior of SiC particle reinforced aluminum composites, *Scripta Mater.* **51** (2004), pp. 161–165.
- [72] J. Mackerle: Metal matrix composites: finite element and boundary element analyses – A bibliography (1997–2000), *Finite Elem. Anal. Design* **38** (2002), pp. 659–667.
- [73] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor: The Finite Element Method – Volume 1: The Basis, 5th edition (Butterworth-Heinemann, Oxford) (2000).
- [74] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor: The Finite Element Method – Volume 2: Solid Mechanics, 5th edition (Butterworth-Heinemann, Oxford) (2000).
- [75] O. C. Zienkiewicz, J. Z. Zhu: Superconvergent patch recovery and a posteriori error estimation in the finite element method, Part I: A general superconvergent recovery technique, *Internat. J. Num. Meth. Eng.* **33** (1992), pp. 1331–1364.
- [76] O. C. Zienkiewicz, J. Z. Zhu: The superconvergent patch recovery (SPR) and a posteriori error estimates, Part II: Error estimates and adaptivity, *Internat. J. Num. Meth. Eng.* **33** (1992), pp. 1365–1382.
- [77] O. C. Zienkiewicz, J. Z. Zhu: The superconvergent patch recovery (SPR) and adaptive finite element refinement, *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* **101** (1992), pp. 207–224.
- [78] B. Boroomand, O. C. Zienkiewicz: Recovery by equilibrium patches (REP), *Internat. J. Num. Meth. Eng.* **40** (1997), pp. 137–154.
- [79] B. Boroomand, O. C. Zienkiewicz: An improved REP recovery and the effectivity robustness test, *Internat. J. Num. Meth. Eng.* **40** (1997), pp. 3247–3277.

-
- [80] O. C. Zienkiewicz, J. Z. Zhu: A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis, *Internat. J. Num. Meth. Eng.* **24** (1987), pp. 337–357.
- [81] P. Ladeveze, D. Leguillon: Error estimate procedure in the finite element method and applications, *SIAM J. Num. Anal.* **20** (1983), pp. 485–509.
- [82] R. E. Bank, A. Weiser: Some a posteriori error estimators for elliptic partial differential equations, *Math. Comput.* **44** (1985), pp. 283–301.
- [83] M. Ainsworth, J. T. Oden: A unified approach to a posteriori error estimation using element residual methods, *Numerische Mathematik* **65** (1993), pp. 23–50.
- [84] MSC.Mentat 2005, MSC.Software Corporation, Santa Ana
- [85] A. C. Kak, M. Slaney: Principles of Computerized Tomographic Imaging. (IEEE Press, New York) (1988)
- [86] A. Guinier: X-ray Diffraction in Crystals, Imperfect Crystals and Amorphous Bodies, (Freeman and Co., San Francisco and London) (1964).
- [87] J. M. Cowley: Diffraction Physics, (North-Holland Publ. Co., Amsterdam and Oxford) (1975).
- [88] P. Cloetens, W. Ludwig, J.-P. Guigay, J. Baruchel, M. Schlenker, D. Van Dyck: Phase contrast tomography, in: *X-ray Tomography in Material Science*, eds: J. Baruchel, J.-Y. Buffière, E. Maire, P. Merle, G. Peix, (Hermes Science Publications, Paris) (2000), pp. 29–44.
- [89] P. Cloetens, W. Ludwig, J. Baruchel, D. van Dyck, J. van Landuyt, J.P. Guigay, M. Schlenker: Holotomography: Quantitative phase tomography with micrometer resolution using hard synchrotron radiation x rays, *Appl. Phys. Lett.* **75** (1999), pp. 2912–2914.
- [90] W. Coene, G. Janssen, M. Op de Beeck, D. Van Dyck: Phase Retrieval through Focus Variation for Ultra-Resolution in Field-Emission Transmission Electron Microscopy, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), pp. 3743–3746.
- [91] K. A. Nugent, T. E. Gureyev, D. F. Cookson, D. Paganin, and Z. Barnea: Quantitative Phase Imaging Using Hard X Rays, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996), pp. 2961–2964.
- [92] H. F. Talbot: Facts relating to optical science; No. IV., *Philos. Mag.* **9** (1836), pp 401–407.
- [93] J. P. Guigay: Fourier transform analysis of Fresnel diffraction patterns and in-line holograms, *Optik* **49** (1977), pp. 121–125.
- [94] F. F. Csikor, A. Borbély: tomo3d, <http://metal.elte.hu/tomo3D>.
- [95] J. Llorca, C. González: Microstructural factors controlling the strength and ductility of particle-reinforced metal-matrix composites, *J. Mech. Phys. Solids* **46** (1998), pp. 1–5.
- [96] J. W. Leggoe, A. A. Mammoli, M. B. Bush, X. Z. Hu: Finite element modelling of deformation in particulate reinforced metal matrix composites with random local microstructure variation, *Acta Mater.* **46** (1998), pp. 6075–6088.

-
- [97] L. J. Gibson, M. F. Ashby: Cellular solids – structure and properties. (Cambridge University Press, Cambridge) (1997).
- [98] J. R. Willis: The overall elastic response of composite materials, *ASME J. Appl. Mech.* **50** (1983), pp. 1202–1209.
- [99] G. W. Milton: The Theory of Composites, (Cambridge University Press) (2002).
- [100] E. Kröner: Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen, *Ergebn. angew. Math.* 5 (Springer Verlag, Berlin) (1958).

12 Összefoglaló

A tudományos érdeklődés már régóta irányul a valódi heterogén anyagok effektív tulajdonságainak leírására. A nehézségek a megfelelő háromdimenziós mikroszerkezeti jellemzési technikák hiányával kapcsolatosak, amelyek megnehezítik az eddig létező elméleti közelítések alkalmazását. Annak ellenére, hogy a heterogén anyagok effektív tulajdonságait nem eléggé ismerjük, a kompozitok alkalmazása a gyakorlatban egyre gyakoribb.

Kutatásainkban célul tűztük ki egy valódi részecskeerősítésű fémmátrixú kompozit rugalmas és képlékeny tulajdonságainak becslését statisztikusan előállított modellek segítségével, amelyek a kompozit valódi szerkezetét veszik alapul. A szinkrotronos mérés technika fejlődésének köszönhetően mikrotomográfiai módszerekkel rekonstruálhatjuk egy AA6061 ötvözet alapú 20% térfogati hányadban Al_2O_3 kerámia részecskéket tartalmazó fémmátrixú kompozit háromdimenziós mikroszerkezetét. Ennek ismeretében a mikroszerkezet részletes statisztikus analízisét végeztük, melynek eredménye (a részecskék méretének, alakjának, elrendeződésének és lokális környezetének, valamint a szerkezet egyéb statisztikus tulajdonságainak, korrelációs hosszainak leírása) alapján megfelelő háromdimenziós vége-selemmodelleket építettünk. Az effektív tulajdonságokat olyan kis képlékeny deformációig tartó egytengelyű összenyomási vizsgálatok esetére számítottuk, amelyre még az anyagkárosodás ismertén elhanyagolható mértékű.

Annak érdekében, hogy azt a hatalmas számítási igényt, amely a közvetlen modellezéshez szükséges, elkerüljük, három, különböző átlagolási stratégián alapuló módszert vizsgáltunk: a lokális szerkezet finom részleteit elfedő átlagolási ablak-módszert, a részecske lokális környezetét jól közelítő, de a globális szerkezetet átlagoló egységcellamodelleket, és az ezek eredményeire épülő nagyobb méretskálát is figyelembe vevő multiskálás modelleket. Ezek a modellek nem csak a rugalmas tulajdonságokra adtak jó közelítést, hanem az egész alakítási görbére 2% os deformációig.

A szerkezet közvetlen modellezését is elvégeztük statisztikus szempontból elegendően nagy tomografikusan rekonstruált térfogatok segítségével, és optimális stratégiát dolgoztunk ki a kompozit effektív tulajdonságainak becslésére annak szerkezeti rekonstrukciója alapján. Ez az újonnan bevezetett átlagablak-módszer lehetővé tette a vizsgált kompozit effektív rugalmas tulajdonságainak 2%-nál pontosabb jóslhatóságát, amely sokkal pontosabb, mint a gyakran használt Hashin–Shtrikman-határok.

13 Summary

There is a long standing scientific interest in predicting effective properties of real heterogeneous materials. Difficulties are mainly related to the lack of adequate three-dimensional characterization techniques of the microstructure, which impede application of existing theoretical approaches. In spite of this scarce understanding of overall properties of heterogeneous materials the utilization of composites in practice is becoming more and more frequent.

This work deals with the estimation of the elastic and plastic effective properties of a real particle reinforced metal-matrix composite using statistically derived models based on the real structure of the composite. Due to advances in synchrotron instrumentation the three dimensional microstructure of a metal-matrix composite consisting of an AA6061 alloy reinforced with 20 vol% Al_2O_3 ceramic particles could be reconstructed by microtomography. This allowed a detailed statistical analysis of the microstructure, based on which results (description of the size, form, arrangement, and local surroundings of particulates, furthermore other statistic properties and correlation lengths of the structure) adequate three dimensional finite element models were constructed. Effective properties were calculated considering uniaxial compression tests until small plastic strains, when it is known that damage is negligible.

In order to avoid the enormously large computational costs needed for direct modeling, three methods based on different averaging strategies were investigated: the averaging window method, which smooths out the fine details of the local structure; the unit cell models, which emphasize more the shape and local structure of the particles (but averaging out the global structure); and on the basis of these results, the multiscale models, which take a higher size scale into account. These models provided good estimations not only for the elastic properties, but the whole stress-strain curve until strain of 2%.

Direct modeling of the structure was also performed using tomographically reconstructed volumes large enough from statistical point of view and an optimum strategy for the estimation of effective properties of the composite based on its reconstructions has been worked out. This newly developed mean window method was able to predict effective elastic properties of the studied composite with accuracy better than 2%, much more accurate than the often used Hashin-Shtrikman bounds.