مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها/ سال۱۴۰۵/ دوره ۱۶/ شماره ۴/ صفحه ۵۰۱-۵۱۸

نشریه مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها

DOI: **10.22044/JSFM.2026.17662.4062**

شبیه‌سازی چندمقیاسی رشد ترک در نانوکامپوزیت‌های سیلیکا/اپوکسی با استفاده از رویکرد ترکیبی XFEM وCZM

قدیر احمدی جید [۱] ، حسن بیگلری [۲،*] ، تاجبخش نوید چاخرلو [۳]، چانگفنگ ژائو [۴]

[۱] دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

[۲] دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

[۳] استاد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

[۴] دانشیار ، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی هفی ، هفی، جمهوری خلق چین.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۲/۱۳؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۴/۲۸؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۵/۱۹

چکیده

یکی از چالش‌های اساسی در تحلیل نانوکامپوزیت‌ها، پیش‌بینی دقیق مکانیزم‌های آغاز و رشد ترک است. افزودن نانوذرات سیلیکا به ماتریس اپوکسی می‌تواند با افزایش چقرمگی شکست، بهبود مقاومت ضربه‌ای و کاهش تردی، عملکرد مکانیکی این مواد را ارتقا دهد. این بهبود عمدتاً ناشی از مکانیزم‌هایی مانند انحراف مسیر ترک، ایجاد نواحی کرنش پلاستیک موضعی و توزیع یکنواخت‌تر تنش در ماتریس است. در پژوهش حاضر، فرآیند رشد ترک در نانوکامپوزیت سیلیکا/اپوکسی با استفاده از یک رویکرد چندمقیاسی در مقیاس‌های میکرو، مزو و ماکرو شبیه‌سازی شده است. تحلیل‌های عددی با استفاده از روش اجزای محدود (FEM) در نرم‌افزار آباکوس و ترکیب روش ناحیه چسبنده (CZM) برای مدل‌سازی جدایش بین‌سطحی و روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) برای پیش‌بینی رشد ترک انجام شده‌اند.در مقیاس میکرو، حجم نماینده ماده (RVE) مبتنی بر یک سلول تکی بررسی و تأثیر نوع اتصال نانوذره و ماتریس ارزیابی شد. در مقیاس مزو، انتشار ترک در محیط ناهمگن حاوی نانوذرات سیلیکا مطالعه گردید. در مقیاس ماکرو نیز نانوکامپوزیت به‌صورت محیطی همگن در نظر گرفته شد و خواص مؤثر مقیاس‌های پایین‌تر اعمال گردید. نتایج اعتبارسنجی نشان می‌دهد که این رویکرد چندمقیاسی قادر است رفتار مکانیکی و مسیر رشد ترک را با دقت مناسبی پیش‌بینی کرده و درک بهتری از مکانیزم‌های شکست فراهم آورد.

کلمات کلیدی: مواد کامپوزیتی؛ رشد ترک؛ مدل‌سازی چندمقیاسی؛ روش اجزای محدود توسعه‌یافته؛ مدل ناحیه چسبنده؛ مود شکست؛ روش عددی.

Multiscale Simulation of Crack Growth in Silica/Epoxy Nanocomposites Using a Coupled XFEM–CZM Approach

Ghadir Ahmadi Jeyed[1], Hasan Biglari[2,*], Tajbakhsh Navid Chakherlou [3], Changfang Zhao [4]

[1] Ph.D. Student, Faculty of Mechanical Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran.

[2] Assoc. Prof., Faculty of Mechanical Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran.

[3] Prof., Faculty of Mechanical Engineering, University of Tabriz, Tabriz, Iran.

[4] Assoc. Prof., School of Mechanical Engineering, Hefei University of Technology, Hefei, People's Republic of China.

Abstract

One of the major challenges in nanocomposite analysis is the accurate prediction of crack initiation and propagation mechanisms. Incorporating silica nanoparticles into epoxy matrices enhances fracture toughness, impact resistance, and reduces brittleness. These improvements are mainly attributed to mechanisms such as crack deflection, localized plastic deformation, and effective stress redistribution within the matrix. In this study, crack growth in silica/epoxy nanocomposites was simulated using a multiscale approach encompassing the micro-, meso-, and macro-scales. Numerical simulations were performed using the Finite Element Method (FEM) in ABAQUS, combining the Cohesive Zone Model (CZM) for interfacial debonding with the Extended Finite Element Method (XFEM) for crack propagation without remeshing. At the microscale, a Representative Volume Element (RVE) based on a single-cell model was analyzed to investigate the influence of particle–matrix interfacial bonding. At the mesoscale, crack propagation in a heterogeneous medium containing silica nanoparticles was evaluated to determine their role in altering the fracture path and governing failure mechanisms. At the macroscale, the nanocomposite was modeled as an equivalent homogeneous material using effective properties obtained from lower scales. Validation against published results demonstrated that the proposed framework can accurately predict mechanical behavior and fracture evolution, providing valuable insight into damage and fracture mechanisms in silica/epoxy nanocomposites.

Keywords: Composite materials; crack growth; multiscale modeling; extended finite element method; cohesive zone model; fracture mode; numerical method.

* نویسنده مسئول: ۰۹۱۲۶۳۶۲۳۷۶؛ فکس: ۰۴۱۳۳۳۹۲۴۵۷

آدرس پست الکترونیک: hbiglari@tabrizu.ac.ir

۱- مقدمه

ترک‌ها از مهم‌ترین نشانه‌های خرابی مواد به شمار می‌آیند و ریزترک‌ها اولین مرحله از فرایند شکست محسوب می‌شوند. از آنجا که ترک‌ها می‌توانند در طول زمان رشد کرده و گسترش یابند، ممکن است در نهایت به شکست فاجعه‌آمیز منجر شوند. بنابراین شناسایی و مشخصه‌یابی آن‌ها برای پایش سلامت سازه و ارزیابی یکپارچگی ساختاری ضروری است [۱]. هرچند رشد ترک در مواد همسانگرد به خوبی مطالعه و مدل‌سازی شده است، اما درک این پدیده در مواد کامپوزیتی همچنان چالش‌برانگیز باقی مانده است. کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با الیاف و ذرات به دلیل وزن کم، چقرمگی بالا و نسبت بالای استحکام و سفتی به وزن، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۳–۲]. بااین‌حال، ریزساختار ناهمگن آن‌ها موجب پیچیدگی رفتار رشد ترک می‌شود؛ به‌ویژه در کاربردهای حساس هوافضا و دریایی، که در آن بارهای مکانیکی و حرارتی می‌توانند تشکیل ترک را تسریع کنند. این پیچیدگی، نیاز به روش‌های پیشرفته برای پیش‌بینی عمر و بهبود عملکرد سازه‌ای را برجسته می‌کند.

ذرات تقویت‌کننده اثر قابل‌توجهی بر رفتار ترک در کامپوزیت‌ها دارند. عواملی همچون کسر حجمی، نحوه توزیع و میزان چسبندگی بین‌سطحی آن‌ها با ماتریس بر مکانیزم‌های شکست اثر گذاشته و می‌توانند مسیرهای غیرخطی ترک یا حالت‌های متفاوتی از شکست را ایجاد کنند. بنابراین، درک این مکانیزم‌ها برای طراحی کامپوزیت‌های چقرمه‌تر ضروری است [۴]. مطالعات اولیه برای افزایش چقرمگی شکست اپوکسی از افزودنی‌هایی نظیر لاستیک [۵] یا ذرات ترموپلاستیک [۶] استفاده کردند، اگرچه این رویکردها اغلب موجب کاهش برخی خواص مکانیکی پایه می‌شدند. برای رفع این محدودیت، پرکننده‌های معدنی در مقیاس میکرومتر مانند سیلیکا، آلومینا و ذرات شیشه معرفی شدند که بدون کاهش جدی خواص مکانیکی، چقرمگی شکست را بهبود می‌بخشند [۸–۷]. در سال‌های اخیر، افزودن نانوسیلیکا به ماتریس‌های اپوکسی [۹] پیشرفت چشمگیری در مدول الاستیک، استحکام تسلیم و چقرمگی شکست ایجاد کرده است. این افزایش عملکرد از مکانیزم‌هایی همچون مهار ترک (crack pinning) [۵،۱۰]، انحراف ترک [۱۱]، جداشدگی ذره–ماتریس [۱۲] و تغییر شکل پلاستیک موضعی [۱۳] ناشی می‌شود.

نانوکامپوزیت‌های سیلیکا/اپوکسی به دلیل توانایی در مقاومت در برابر رشد ترک و افزایش ایمنی سازه‌ای، جایگاه ویژه‌ای در صنایع هوافضا، دریایی و دفاعی دارند. رزین‌های اپوکسی که به‌طور گسترده به‌عنوان چسب و ماتریس در کامپوزیت‌های الیافی استفاده می‌شوند، اگرچه استحکام و سفتی بالایی دارند، اما ذاتاً ترد هستند. افزودن نانوسیلیکا این محدودیت را کاهش می‌دهد. برای نمونه، زمانیان و همکاران نشان دادند که کاهش اندازه ذرات یا استفاده از توزیع دومدی نانوسیلیکا موجب افزایش قابل‌توجه مدول یانگ، استحکام کششی و چقرمگی شکست می‌شود [۵].

در مقیاس میکرومکانیکی، عناصر حجمی نماینده (RVE) برای مدل‌سازی مکانیزم‌های شکست در مواد ناهمگن مورد استفاده قرار گرفته‌اند. گیتمن و همکاران نشان دادند که اندازه RVE تابع میزان ناهمگنی ماده و شرایط بارگذاری است [۱۴]. هیگوچی و همکاران با بهره‌گیری از XFEM در کامپوزیت‌های CFRP نشان دادند که شکل الیاف بر خواص عرضی کامپوزیت اثرگذار است [۱۵]. فریدون و همکاران نیز ثابت کردند که افزایش مقدار و بهینه‌سازی جهت‌گیری CNTها می‌تواند به افزایش چقرمگی شکست منجر شود [۱۶].

به طور کلی، توسعه مدل‌های دقیق برای آغاز و رشد ترک در نانوکامپوزیت‌های پلیمری به‌ویژه سامانه‌های سیلیکا/اپوکسی پایه‌ای ضروری برای توسعه مواد با عملکرد بالا و دوام بیشتر فراهم می‌کند. گارسیا و همکاران اثر اندازه الیاف بر آغاز جداشدگی الیاف-ماتریس تحت بارگذاری کششی عرضی را با ترکیب شبیه‌سازی CZM و تحلیل FFM بررسی کردند. آن‌ها نشان دادند که هر دو روش قادر به پیش‌بینی اثر اندازه الیاف هستند، اما دامنه اعتبار آن‌ها متفاوت است و انتخاب مدل مناسب باید بر اساس مقیاس و خواص ماده انجام شود [۱۷].

لگارت و همکاران جداشدگی بین‌سطحی و ترک‌خوردگی ماتریس را با استفاده از A-FEM و CZM در مواد دوفازی بررسی کردند و مشاهده نمودند که ترک‌ها معمولاً در زاویه ۵۵ تا ۶۰ درجه نسبت به جهت بارگذاری تشکیل شده و از نوک نواحی جداشده آغاز می‌شوند. آن‌ها همچنین نشان دادند که در تقویت‌کننده‌های بیضوی، ترک‌ها از بخش باریک شروع می‌شوند و فاصله بیشتر بین تقویت‌کننده‌ها در جهت بارگذاری موجب افزایش ظرفیت تحمل بار می‌گردد [۱۸].

نقدینسب و همکاران با استفاده از XFEM و CZM نشان دادند که جداشدگی بین‌سطحی یکی از نخستین مودهای شکست در RVEهاست و می‌تواند به‌صورت هم‌زمان یا پی‌درپی با ترک‌خوردگی ماتریس رخ دهد [۱۹]. فرخ‌آبادی و همکاران دامنه تحلیل را به RVEهای بزرگ‌تر توسعه دادند و با XFEM و CZM ترک‌خوردگی ماتریس، شکست الیاف و جدایش را شبیه‌سازی کردند. آن‌ها نشان دادند که RVEهای بزرگ‌تر و مدلسازی دقیق ناهمگنی‌های ریزساختاری پیش‌بینی‌پذیری مدل را افزایش می‌دهند و تأیید کردند که شکست بین‌سطحی، عامل اصلی کاهش سفتی و آغاز جدایش است [۲۲–۲۰]. به صورت مشابه، مددی و همکاران با مدل‌سازی لمینیت‌های کربن/اپوکسی تقویت‌شده با میکروتیوب‌های شیشه‌ای نشان دادند که گرچه این تقویت‌کننده‌ها مقاومت اولیه در برابر ترک‌خوردگی را اندکی کاهش می‌دهند، اما در ادامه رشد ترک را به‌طور مؤثر مهار کرده و دلامینیشن را به تأخیر می‌اندازند؛ به‌ویژه زمانی که میکروتیوب‌ها در مرز لایه‌ها به‌صورت آرایش‌یافته قرار گیرند [۲۳].

زمانیان و همکاران گزارش کردند که ضخامت ناحیه بین‌فازی و ابعاد نانوذرات اثر چشمگیری بر مدول کشسی اپوکسی/سیلیکا دارند و مدل چندمقیاسی آن‌ها بر پایه XFEM چقرمگی شکست را با دقت بالایی پیش‌بینی می‌کند [۲۴–۲۵]. نی و همکاران یک مدل پیشرفته پری‌داینامیک مبتنی بر پیوند با قانون دوخطی و فرمول‌بندی تجمعی آسیب توسعه دادند که قادر است پدیده‌هایی مانند جداشدگی بین‌سطحی، انحراف ترک و اثر توزیع و تعداد ذرات را شبیه‌سازی کند. نتایج نشان داد که توزیع ذرات اثر چشمگیری بر مسیر ترک دارد و افزایش غلظت ذرات معمولاً مقاومت کلی را کاهش می‌دهد [۲۶].

تان و مارتینز-پانادا چارچوبی ترکیبی بر پایه مدل میدان فاز شکست (PFFM) و CZM ارائه کردند و نشان دادند که افزایش چقرمگی ماتریس مؤثرترین روش برای افزایش مقاومت شکست است، در حالی که استحکام بین‌سطحی ظرفیت بار نهایی را کنترل می‌کند. همچنین نشان دادند که تخلخل می‌تواند با کندسازی نوک ترک موجب افزایش چقرمگی شود [۲۷].

چانگفنگ ژائو و همکاران با استفاده از PDM، XFEM و شبیه‌سازی RVE رشد ترک درون‌لایه‌ای در کامپوزیت‌های الیاف شیشه را بررسی کرده و تأیید کردند که پل‌زنی الیاف مؤثرترین مکانیزم افزایش چقرمگی است [۲۸]. ژائو و همکاران همچنین نقش نانوذرات مختلف پلیمرها، لاستیک مایع و نانوسیلیکا را در بهبود خواص مکانیکی اپوکسی بررسی کردند [۲۹]. تان و همکاران نیز نتیجه گرفتند که نانوسیلیکا بیشترین تأثیر را بر افزایش چقرمگی دارد، در حالی که برخی نانوپلیمرها ممکن است استحکام کششی را کاهش دهند [۳۰].

لو و همکاران یک رویکرد چندمقیاسی مبتنی بر میدان فاز توسعه دادند که شامل RVEهای ریزساختاری بوده و قادر است شکست پیشرونده شامل ترک‌خوردگی ماتریس، شکست الیاف و دلامینیشن را بازتولید کند؛ پیش‌بینی‌های مدل با نتایج تجربی مطابقت بالایی داشته و اعتبار چارچوب RVE میدان فاز را تأیید می‌کند [۳۱].

پرمنون و همکاران با توسعه یک رویکرد دومقیاسی (ماکرو–مزو)، نواحی بحرانی رشد ترک را ابتدا در مقیاس ماکرو و با استفاده از روش XFEM شناسایی کرده و سپس تحلیل دقیق آن‌ها را در مقیاس مزوسکوپی انجام دادند. در این مدل، توزیع تصادفی ذرات و رفتار غیرخطی فازهای مختلف ماده در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد که این رویکرد ضمن کاهش هزینه محاسباتی، دقت مناسبی در پیش‌بینی آغاز و گسترش ترک فراهم می‌کند[۳۲].

نوآوری اصلی این پژوهش در توسعه یک چارچوب چندمقیاسی با سازگاری فیزیکی نهفته است که به‌طور همزمان مکانیزم‌های آسیب در مقیاس میکرو، تکامل مسیر ترک در مقیاس مزو و پاسخ مؤثر در مقیاس ماکرو را در نانوکامپوزیت‌های سیلیکا/اپوکسی به یکدیگر مرتبط می‌سازد. در مقیاس میکرو، مدل‌سازی مبتنی بر حجم نماینده (RVE) در دو پیکربندی تک‌ذره‌ای (سلول واحد) و خوشه‌ای انجام شده است تا مکانیزم‌های غالب آسیب شامل آغاز و رشد جدایش بین‌سطحی ذره–ماتریس و ترک‌خوردگی ماتریس به‌صورت صریح شبیه‌سازی شوند. در این راستا، علاوه بر به‌کارگیری مدل ناحیه چسبنده (CZM) برای فصل مشترک، مورد استفاده قرار گرفته تا حساسیت پاسخ شکست نسبت به شرایط مرزی بین‌سطحی بررسی شود.

در مقیاس مزو، یک مدل نماینده از مؤلفه سازه‌ای توسعه داده شده است که در آن نانوذرات به‌صورت صریح در ساختار لحاظ شده‌اند. این سطح از مدل‌سازی امکان شبیه‌سازی رشد واقعی ترک و انحراف مسیر آن تحت تأثیر مستقیم نانوذرات را فراهم می‌کند؛ پدیده‌ای که در مدل‌های کلاسیک همگن‌شده ماکروسکوپی، که صرفاً اثرات میانگین را نمایش می‌دهند، قابل بازنمایی دقیق نیست.

در نهایت، با ترکیب همگن‌سازی مبتنی بر RVE در مقیاس میکرو و مدل‌سازی صریح رشد ترک در مقیاس مزو، چارچوب پیشنهادی امکان تفسیر کمی‌تر مکانیزم‌های شکست و تکامل ترک در نانوکامپوزیت‌های سیلیکا/اپوکسی را فراهم می‌سازد. این روش به‌عنوان یک مسیر محاسباتی مبتنی بر اجزای محدود، قابلیت پیش‌بینی رشد ترک را با حداقل وابستگی به آزمایش‌های تجربی ارائه می‌دهد. هدف نهایی، بازتولید رفتار شکست نانوکامپوزیت صرفاً بر اساس شبیه‌سازی عددی در مقیاس‌های میکرو، مزو و ماکرو است؛ به‌گونه‌ای که ضمن کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی و محاسباتی، امکان تحلیل قابل اعتماد آغاز آسیب، انتشار ترک و تکامل مسیر ترک فراهم گردد.

۲- روشهای مدلسای رشد ترک

۲-۱- روش اجزای محدود توسعه‌یافته XFEM

مدل‌سازی ناپیوستگی‌های ایستا، نظیر ترک‌ها، با استفاده از روش متداول اجزای محدود (FEM) مستلزم آن است که شبکه‌بندی المان‌ها به‌طور کامل با هندسه ناپیوستگی منطبق باشد. در مسئله ترک، این الزام به معنای هم‌راستا بودن مرز المان‌ها با سطوح ترک و ریزشدگی قابل‌توجه شبکه در ناحیه مجاور نوک ترک است. چنین محدودیتی نه‌تنها تعداد المان‌ها و هزینه محاسباتی را افزایش می‌دهد، بلکه در مسائل مرتبط با رشد و انتشار ترک، فرآیند تولید و به‌روزرسانی شبکه را نیز به کاری پیچیده و زمان‌بر تبدیل می‌کند. افزون بر این، بازتولید دقیق میدان‌های تکین تنش و کرنش در نزدیکی نوک ترک مستلزم استفاده از شبکه‌ای بسیار ریز است تا رفتار مجانبی این میدان‌ها به‌درستی تقریب زده شود.

به‌منظور رفع این محدودیت‌ها، روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) معرفی شد. این روش که نخستین‌بار توسط بلیتسکو و بلک ارائه گردید[۳۳]. ضمن حفظ چارچوب اصلی روش اجزای محدود، امکان مدل‌سازی ناپیوستگی‌ها را بدون نیاز به انطباق شبکه با هندسه ترک فراهم می‌سازد.

XFEMبر پایه مفهوم افراز واحدکه توسط ملنک و بابوشکا توسعه یافته است بنا شده است[۳۴]. این مفهوم اجازه می‌دهد توابع غنی‌سازی به‌صورت موضعی به تقریب میدان جابه‌جایی افزوده شوند، بدون آنکه ساختار اصلی روش اجزای محدود یا ویژگی‌های مهمی نظیر تقارن ماتریس سفتی دچار اختلال شود.

در روش المان توسعه یافته، حضور ترک و سایر ناپیوستگی‌ها، از جمله فصل مشترک‌ها، لایه‌ها و مرزهای داخلی، از طریق افزودن توابع غنی‌سازی مناسب به فضای تقریب جابه‌جایی مدل‌سازی می‌شود. همان‌گونه که در معادله (۱) نشان داده شده است، این توابع غنی‌سازی به تقریب استاندارد اجزای محدود افزوده می‌شوند تا رفتارهای ویژه ناشی از وجود ناپیوستگی را بازتولید کنند. به‌طور خاص، این توابع قادرند پرش جابه‌جایی در دو سطح ترک و همچنین میدان‌های تکین تنش و کرنش در ناحیه نوک ترک را با دقت مناسبی مدل‌سازی نمایند. به‌کارگیری این توابع مستلزم تعریف درجات آزادی اضافی برای گره‌های واقع در مجاورت ناپیوستگی است؛ با این حال، چارچوب اصلی روش اجزای محدود و ویژگی‌های مهم آن، نظیر تقارن ماتریس سختی و سازگاری با نرم‌افزارهای متداول تحلیل مهندسی، همچنان حفظ می‌شود[۳۳].

$$u(x) = \sum_{i\in N} N_i(x)u_i + \sum_{j\in N_H} N_j(x)H(x)a_j + \sum_{k\in N_F} N_k(x)\sum_{\alpha=1}^{4} F_\alpha(x)b_k^\alpha \qquad (۱)$$

در نرم‌افزار آباکوس، دو رویکرد اصلی برای شبیه‌سازی رفتار ترک با استفاده از XFEM وجود دارد:

۱. قانون خطی الاستیک کشش جدایش
۲. مکانیک شکست الاستیک خطی

رویکرد اول مبتنی بر مدل ناحیه چسبنده است و رشد ترک را از طریق رابطه تنش - جدایش میان سطوح ترک شبیه‌سازی می‌کند. این مدل امکان تحلیل فرآیند تدریجی آسیب و

جدایش ماده را فراهم کرده و برای مواد ترد و نیمه‌ترد بسیار مناسب است. در مقابل، رویکرد LEFM بر معیارهای انرژی یا تنش در نوک ترک مانند ضریب شدت تنش (SIF) تکیه دارد و رشد ترک را به‌صورت پدیده‌ای ناگهانی و بدون لحاظ ناحیه جدایش محدود مدل‌سازی می‌کند.

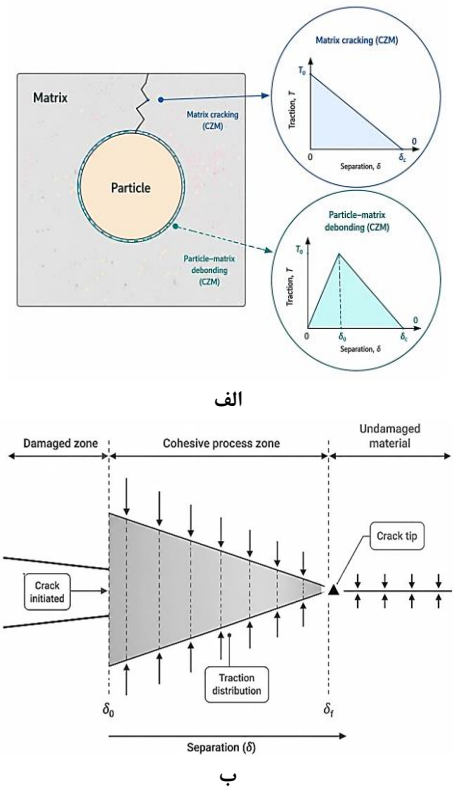
در این پژوهش از نظریه خطی الاستیک کشش–جدایش استفاده شده است. دلیل این انتخاب آن است که این مدل امکان شبیه‌سازی دقیق‌تر فرآیند آسیب و جدایش در ناحیه نوک ترک را فراهم می‌کند و ابزار مناسبی برای تحلیل رفتار مواد تحت بارگذاری‌های پیچیده و شناسایی مکانیزم‌های آغاز و گسترش شکست به شمار می‌رود. جزئیات این مدل، شامل توابع غنی‌سازی، معیارهای رشد ترک و پارامترهای ماده، در بخش بعدی ارائه خواهد شد.

۲-۲- مدل ناحیه چسبنده (CZM)

مدل ناحیه چسبنده (Cohesive Zone Model یا CZM) که نخستین بار توسط بارنبلات [۳۵] و داگدیل [۳۶] مطرح شد، رفتار مکانیکی غیرخطی در ناحیه نزدیک نوک یک ترک از پیش موجود را توصیف می‌کند. این مدل با تعریف یک رابطه کشش–جدایش، از بروز تکینگی تنش جلوگیری کرده و امکان شبیه‌سازی فرآیند تدریجی آسیب و گسترش آن تا رسیدن به شکست نهایی را فراهم می‌سازد. امروزه CZM به‌عنوان روشی قدرتمند برای تحلیل شکست در گستره وسیعی از مواد شامل پلیمرها، فلزات، سرامیک‌ها، مواد ناهمسان و لایه‌ای، بتن و کامپوزیت‌ها به‌طور گسترده به کار گرفته می‌شود[۳۷].

یکی از کاربردهای مهم CZM، مدل‌سازی فرایند جداشدگی (Debonding) بین الیاف یا ذرات و ماتریس در مواد کامپوزیتی است. در این‌گونه مسائل، معمولاً از یک قانون کشش–جدایش دوخطی برای توصیف رفتار نرمال و برشی فصل مشترک استفاده می‌شود. پارامترهای اصلی مشخص‌کننده رفتار چسبنده عبارت‌اند از: سفتی اولیه فصل مشترک (K)، استحکام یا تنش بیشینه (σ_1) و انرژی شکست (G_i). مطابق کار کامانیو و داویلا [۳۸] می‌توان از یک معیار جابه‌جایی مؤثر برای تعریف تکامل آسیب تحت بارگذاری مود ترکیبی استفاده کرد؛ بدین معنا که جدایش‌های نرمال و برشی به‌طور هم‌زمان در نظر گرفته می‌شوند. مدل CZM این قابلیت را دارد که بدون نیاز به دانستن مسیر ترک از پیش، شکست را به‌صورت واقع‌بینانه شبیه‌سازی کند؛ مشروط بر اینکه المان‌های چسبنده در تمامی نواحی بالقوه شکست تعریف شوند.

همچنین ریزشدگی مناسب شبکه نقش تعیین‌کننده‌ای در کیفیت نتایج دارد؛ به‌طور معمول، وجود سه تا پنج المان چسبنده در عرض ناحیه فرآیند شکست برای بازتولید دقیق میدان تنش در فصل مشترک ضروری است. روش‌های مختلف مدل‌سازی شکست مانند CZM، XFEM و VCCT دارای مبانی نظری متفاوتی هستند و هرکدام در سناریوهای خاصی بهترین عملکرد را ارائه می‌دهند. در این میان، مدل CZM به‌ویژه برای شکست‌های کنترل‌شده توسط فصل مشترک، مانند جداشدگی ذره - ماتریس، بسیار کارآمد است و می‌تواند پیش‌بینی دقیقی از آغاز ترک و مسیر رشد آن ارائه دهد(شکل ۱).



الف

ب

شکل ۱- (الف) نمایی از RVE آسیب‌دیده که مودهای مختلف آسیب را نشان می‌دهد، و (ب) نمای شماتیک مدل ناحیه چسبنده (CZM) که در آن آسیب در فصل مشترک متمرکز شده است[۱۹].

معادله (۲) کشش نرمال چسبنده T_n را برحسب جابجایی نسبی بین دو سطح ترک تعریف می‌کند. المان چسبنده زمانی دچار شکست کامل می‌شود که این جابجایی به مقدار بحرانی و وابسته به ماده یعنی (δ_0) برسد؛ در این نقطه، تنش متناظر به صفر کاهش می‌یابد.

تابع $f(\delta)$توزیع تنش را در طول سطوح ترک درون ناحیه چسبنده توصیف می‌کند، همان‌گونه که به صورت شماتیک در شکل ۱ نشان داده شده است[۱۹].

$$T_n = f(\delta) \quad (۲)$$

انرژی شکست (G_c) نیز می‌تواند به عنوان مساحت زیر منحنی تنش–جدایش (T–δ) محاسبه شود، که بیانگر انرژی لازم برای ایجاد و گسترش ترک در فصل مشترک است.

$$G_c = \int_0^{\delta_0} f(\delta)\, d\delta \quad (۳)$$

در حالت قانون کشش-جدایش دوخطی (bilinear traction–separation law)، انرژی شکست (G_c) که رفتار فصل مشترک را کنترل می‌کند، به‌صورت متناظر قابل بیان است.

$$G_c = \frac{1}{2} T\delta \quad (۴)$$

$$T(\delta) = \begin{cases} K\delta & \delta \le \delta_0 \\ \sigma_{max}\left(1 - \dfrac{\delta - \delta_0}{\delta_f - \delta_0}\right) & \delta_0 < \delta \le \delta_f \\ 0 & \delta > \delta_f \end{cases} \quad (۵)$$

۳- رویکرد چندمقیاسی

در این پژوهش، رشد ترک با بهره‌گیری از یک رویکرد چندمقیاسی شامل مقیاس‌های میکرو، مزو و ماکرو شبیه‌سازی شده است. هدف اصلی، بررسی تأثیر کیفیت اتصال بین‌سطحی میان ماتریس اپوکسی و نانوذرات سیلیکا و همچنین نقش توزیع فضایی نانوذرات بر رفتار شکست و مسیرهای رشد ترک در نانوکامپوزیت‌های اپوکسی/سیلیکا است.

بدین منظور، مدل‌سازی‌ها تحت شرایط چسبندگی بین فازهای تشکیل‌دهنده انجام شده تا درک عمیق‌تری از مکانیزم‌های شکست این دسته از نانوکامپوزیت‌ها حاصل شود. برای شبیه‌سازی فرآیند رشد ترک، از روش اجزای محدود در محیط آباکوس استفاده شده و ترکیبی از مدل ناحیه چسبنده و روش اجزای محدود توسعه‌یافته به کار گرفته شده است. این رویکرد ترکیبی، امکان تحلیل دقیق و پویا از تکامل ترک از مراحل اولیه آغاز ترک تا رشد، انحراف مسیر و برهم‌کنش آن با نانوذرات و ناپیوستگی‌های موجود را ارائه می‌دهد. در این میان، XFEM قابلیت دنبال‌کردن رشد ترک بدون نیاز به بازشبکه‌بندی را فراهم می‌کند و CZM نیز با استفاده از قوانین کشش–جدایش، رفتار شکست تدریجی در فصل مشترک فازها را مدل‌سازی می‌نماید.

۳-۱- مقیاس میکرو

در مقیاس میکرو، شبیه‌سازی‌ها بر روی حجم‌های نماینده (RVE) انجام شده تا رفتار مکانیکی موضعی نانوکامپوزیت از آرایش سلول واحد شامل یک نانوذره سیلیکا، ماتریس اطراف آن و فصل مشترک بین دو فاز انجام شده است تا برای تحلیل اثر ریخت‌شناسی نانوذرات به‌ویژه میزان غلظت و آرایش فضایی بر رفتار شکست، مسیر رشد ترک و توزیع تنش در ماتریس به کار گرفته شده‌اند.

۳-۲- مقیاس مزو

در این مقیاس، رشد ترک در یک محیط ناهمگن شامل توزیع واقعی‌تری از نانوذرات مدل‌سازی شده است. رفتار ترک هنگام برخورد با نانوذرات و تغییرات کیفیت اتصال بین‌سطحی به‌طور دقیق تحلیل می‌شود. مکانیزم‌هایی همچون:

- انحراف ترک
- گیر افتادن ترک در فصل مشترک‌ها (crack pinning)
- ایجاد و گسترش ریزترک‌های ثانویه

در این مرحله بررسی شده‌اند. این مکانیزم‌ها نقش چشمگیری در افزایش چقرمگی نانوکامپوزیت دارند.

۳-۳- مقیاس ماکرو

در نهایت، با استفاده از روش‌های همگن‌سازی، خواص مؤثر نانوکامپوزیت مانند مدول الاستیسیته، استحکام کششی و چقرمگی شکست استخراج می‌شود. این خواص همگن‌شده سپس در مدل‌سازی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

بدین ترتیب، رویکرد چندمقیاسی حاضر ارتباطی مستقیم میان ویژگی‌های ریزساختاری (مانند توزیع ذرات و کیفیت اتصال بین‌سطحی)، مکانیزم‌های موضعی شکست و عملکرد کلی سازه برقرار می‌کند.

۴- رویکرد همگن‌سازی

برای محاسبه دقیق خواص مؤثر مواد کامپوزیتی در نرم افزار آباکوس، از آزمون‌های کششی در مقیاس‌های مختلف شامل میکرو، مزو و ماکرو استفاده شده است. به‌طور کلی، دو رویکرد اصلی برای تحلیل چندمقیاسی مواد وجود دارد: رویکرد پایین به بالا و رویکرد بالا به پایین . در این پژوهش، مطابق شکل ۲ و۳، از رویکرد پایین به بالا استفاده شده است؛ به‌گونه‌ای که تحلیل از مقیاس میکرو آغاز شده و پس از استخراج خواص و رفتار مؤثر ماده، نتایج به‌ترتیب به مقیاس‌های مزو و ماکرو منتقل شده‌اند. این رویکرد امکان برقراری ارتباط میان ویژگی‌های ریزساختاری و پاسخ مکانیکی ماده در مقیاس‌های بزرگ‌تر را فراهم می‌کند. همچنین، شکل ۴ شرایط بارگذاری و شرایط مرزی اعمال‌شده در تحلیل‌های چندمقیاسی را نشان می‌دهد که برای استخراج خواص مؤثر و انتقال اطلاعات بین مقیاس‌های مختلف مورد استفاده قرار گرفته‌اند

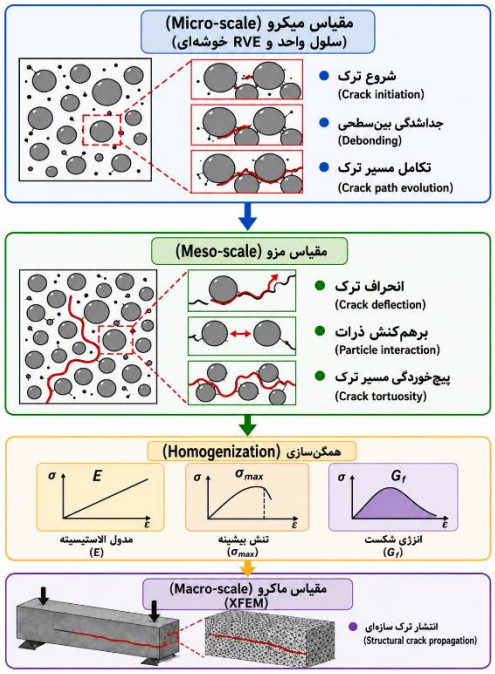
در مدل‌های ماکرو و مزو، از یک نمونه مربعی با ابعاد ۱×۱ میلی‌متر استفاده شد. به‌منظور شبیه‌سازی رفتار شکست و انتشار ترک، یک ترک اولیه به طول ۰/۲۵ میلی‌متر در لبه نمونه ایجاد گردید که معادل ۲۵ درصد عرض نمونه است. تحلیل‌ها به‌صورت دوبعدی و تحت فرض کرنش صفحه‌ای انجام شدند. در مقیاس میکرو، از یک حجم المان نماینده (RVE) با ابعاد ۱۱/۳ در ۱۱/۳ میکرومتر استفاده شد. نانوذرات سیلیکا به‌صورت تصادفی در زمینه اپوکسی توزیع شدند تا ریزساختار واقعی ماده با دقت بیشتری بازنمایی شود.

تمامی مراحل مدل‌سازی، شامل ایجاد هندسه، شبکه‌بندی، اعمال شرایط مرزی، تعریف رفتار فصل مشترک، پیاده‌سازی مدل ناحیه چسبنده(CZM) ، روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM)و استخراج نتایج، در محیط نرم‌افزار آباکوس انجام شد. خواص مکانیکی مؤثر استخراج‌شده از تحلیل RVE پس از فرآیند همگن‌سازی به‌عنوان ورودی مدل‌های مزو و ماکرو مورد استفاده قرار گرفتند.

در تمامی مقیاس‌ها، بارگذاری به‌صورت کشش تک‌محوره و از طریق اعمال جابجایی کنترل‌شده به لبه بالایی نمونه اعمال شد. لبه پایینی در راستای عمودی مقید گردید و برای حذف حرکت جسم صلب، جابجایی افقی یکی از نقاط مرجع محدود شد. این شرایط مرزی امکان ایجاد میدان تنش مناسب و بررسی دقیق فرآیند شکست را فراهم نمود.

شبکه‌بندی مدل‌ها با استفاده از المان‌های دوبعدی چهارگرهی کاهش‌یافته (CPE4R) انجام شد. به‌منظور دستیابی به دقت مناسب در نواحی بحرانی، توزیع مش به‌گونه‌ای انتخاب شد که در اطراف نوک ترک و فصل مشترک ذره–ماتریس، کیفیت و تراکم مناسب المان‌ها حفظ شود. در این نواحی از مش منظم مبتنی بر روش مپینگ (Mapped mesh) استفاده شد تا توزیع یکنواخت المان‌ها و کیفیت شبکه‌بندی تضمین گردد.

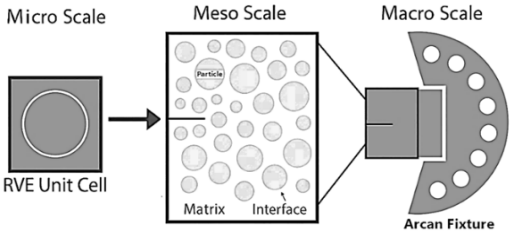
فصل مشترک بین نانوذرات سیلیکا و زمینه اپوکسی با استفاده از مدل ناحیه چسبنده (CZM) شبیه‌سازی شد. رفتار این ناحیه بر اساس قانون دوخطی کشش–جدایش تعریف گردید؛ به‌طوری‌که ابتدا پاسخ الاستیک خطی برقرار بوده و پس از رسیدن تنش به مقدار بحرانی، آسیب آغاز شده و با افزایش جدایش، ظرفیت انتقال تنش کاهش می‌یابد تا جدایش کامل رخ دهد.



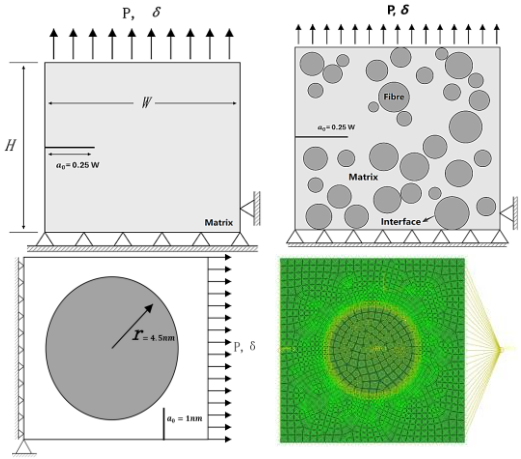
شکل ۲- فلوچارت شبیه سازی چند مقیاسه رشد ترک

همچنین، برای مدل‌سازی رشد ترک در زمینه اپوکسی از روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) استفاده شد. این روش امکان شبیه‌سازی آغاز و انتشار ترک بدون نیاز به بازشبکه‌بندی را فراهم کرده و مسیر رشد ترک را بر اساس معیارهای شکست و میدان تنش به‌صورت خودکار تعیین

می‌کند. بدین ترتیب، با ترکیب XFEM برای پیش‌بینی رشد ترک در ماتریس و CZM برای شبیه‌سازی جدایش بین‌سطحی ذره–ماتریس، امکان بررسی هم‌زمان دو مکانیزم اصلی شکست در نانوکامپوزیت اپوکسی/سیلیکا فراهم شد.



شکل ۳- نمایش شماتیک رویکرد مدل‌سازی چندمقیاسی در مقیاس‌های میکرو، مزو و ماکرو را نشان می‌دهد.



شکل ۴- شرایط بارگذاری و مرزی مورد استفاده در تحلیل چندمقیاسی رشد ترک و همچنین مش ریزی را نمایش می‌دهد.

۴-۱- همگن‌سازی ریزمکانیکی حجم نماینده (RVE)

مدل‌های ریزمکانیکی ابزارهای تحلیلی قدرتمندی برای پیش‌بینی خواص مؤثر کامپوزیت‌ها از جمله مدول الاستیسیته، استحکام نهایی و انرژی شکست بدون نیاز به آزمایش‌های گسترده فراهم می‌کنند. از میان مدل‌های کلاسیک در این حوزه، مدل‌های جی، گوس، کرنر، هالپین - تسای، موری - تاناکا و اشلبی بیشترین کاربرد را دارند[۴۳-۳۹].

مدل هالپین - تسای با وجود ساختار ساده، برای سیستم‌های تقویت‌شده با الیاف بلند یا صفحات عملکرد بسیار مناسبی دارد، هرچند قابلیت آن در توصیف ذرات کروی محدودتر است. در مقابل، مدل اوتراکی با لحاظ‌کردن ناحیه بین‌فازی پلیمری تشکیل‌شده پیرامون نانوذرات، دقت بالاتری در پیش‌بینی رفتار نانوکامپوزیت‌ها فراهم می‌کند. روش موری - تاناکا که بر مبنای تنسور اشلبی و نظریه میدان مؤثر بنا شده است، امکان در نظر گرفتن برهم‌کنش میان ذرات را فراهم می‌کند و برای کامپوزیت‌های دارای الیاف کوتاه یا ذرات کروی روشی پایدار و قابل اتکا است. رویکرد اشلبی که پایه بسیاری از مدل‌های ریزمکانیکی محسوب می‌شود، امکان تحلیل دقیق میدان‌های تنش و کرنش اطراف ناخالصی‌ها را فراهم می‌کند و نقش مهمی در توسعه مدل‌های پیشرفته‌تر داشته است. افزوده‌شدن لایه‌های بین‌فازی به این چارچوب نیز باعث افزایش دقت پیش‌بینی خواص کامپوزیت‌های پلیمری–ذره‌ای می‌شود.

در این پژوهش، از روش اشلبی- موری- تاناکا برای همگن‌سازی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت اپوکسی/سیلیکا استفاده شده است. دلیل این انتخاب آن است که این رویکرد برای ذرات کروی از دقت بالایی برخوردار بوده و می‌تواند اثرات ریزساختاری همچون کسر حجمی و توزیع ذرات را به‌طور مؤثری در محاسبات خواص مؤثر ماده لحاظ کند. بدین ترتیب، چارچوبی تحلیلی و قابل اعتماد برای استخراج خواص ماکروسکوپی نانوکامپوزیت فراهم می‌شود.

۴-۲- المان حجم نماینده (RVE)

حجمی که از یک‌سو به اندازه کافی کوچک باشد تا امکان تحلیل محلی را فراهم کند و از سوی دیگر به اندازه کافی بزرگ باشد تا رفتار ریزساختار را به‌طور آماری نمایندگی کند، حجم نماینده یا RVE نامیده می‌شود. در کاربردهای عملی، معمولاً فرض می‌شود که چنین حجمی وجود دارد و اندازه آن به‌صورت اولیه با توجه به ویژگی‌های ریزساختاری انتخاب می‌شود.

۴-۳- معادلات RVE برای نانوذرات کروی همسانگرد

معادلات مورد استفاده در این پژوهش بر مبنای روابط ارائه‌شده در مرجع اصلی استخراج و برای حالتی تعمیم یافته‌اند که حجم نماینده (RVE) شامل نانوذرات کروی و همسانگرد باشد، نه الیاف یا ذرات با هندسه‌های متفاوت. در این مطالعه، به‌جای استفاده از شرایط مرزی متناوب، شرایط مرزی متقارن اعمال

شده است. با توجه به تقارن هندسی مدل و نوع بارگذاری، این شرایط مرزی قادر است رفتار مکانیکی ریزساختار را در ناحیه مورد بررسی با دقت مناسبی بازنمایی کند. بر اساس مفهوم جداسازی مقیاس‌ها، یک میدان مقیاس‌بندی‌شده تعریف می‌شود که مختصات ماکروسکوپی و میکروسکوپی را به یکدیگر مرتبط می‌سازد. در این چارچوب، مشتقات مکانی میدان‌های مورد مطالعه به صورت مجموع دو مؤلفه مستقل بیان می‌شوند: (۱) مؤلفه وابسته به تغییرات در مقیاس ماکرو و (۲) مؤلفه وابسته به نوسانات موضعی در مقیاس میکرو. این فرمول‌بندی امکان استخراج روابط حاکم بر رفتار مکانیکی حجم نماینده و در نهایت تعیین خواص مؤثر ماده را فراهم می‌کند[۱۹].

$$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+k\hat{y}), \quad k \in Z \tag{۶}$$

$$f^{\zeta}(\boldsymbol{x}) = f\big(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})\big) \tag{۷}$$

در معادله ۶، مختصات ماکروسکوپی x و مختصات میکروسکوپی y از طریق مفهوم جداسازی مقیاس‌ها به یکدیگر مرتبط می‌شوند. مشتق مکانی در شرایط جداسازی مقیاس‌ها (که در آن ζ یک پارامتر کوچک است):

$$f^{\zeta}_{x_i}(x) = f_{x_i}(x,y) + \frac{1}{\zeta} f_{y_i}(x,y) \quad , \quad i \in \{1,2,3\} \tag{۸}$$

۴-۴- تعادل موضعی و روابط رفتاری

در این مدل، شرط تعادل موضعی تنش‌ها برقرار است و رفتار ماده بر اساس قانون الاستیسیته خطی همراه با یک کرنش ذاتی بیان می‌شود. همچنین تعریف کرنش‌های کوچک بر اساس گرادیان جابجایی‌ها به کار گرفته می‌شود.

$$\frac{\partial \sigma^{\zeta}_{ij}}{\partial x_j} + f_i^{\zeta} = 0 \tag{۹}$$

$$\sigma^{\zeta}_{ij} = L^{\zeta}_{ijkl}\left(\varepsilon^{\zeta}_{kl}(x) - \mu^{\zeta}_{kl}(x)\right) \tag{۱۰}$$

$$\varepsilon^{\zeta}_{ij}(x) = u^{\zeta}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i^{\zeta}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{\zeta}}{\partial x_i}\right) \quad , \quad i,j,k,l \in \{1,2,3\} \tag{۱۱}$$

مرز سطحی ناحیه ماکروسکوپی به دو بخش تقسیم می‌شود که روی آن‌ها شرایط مرزی جابجایی و نیرو اعمال می‌شود. در این شرایط، توابع جابجایی و تنش اعمال‌شده مشخص هستند و بردار نرمال واحد سطح نیز تعریف می‌شود.

$$u_i^{\zeta}(x) = \bar{u}_i(x) \qquad \forall x \in S_u \tag{۱۲}$$

$$\sigma_{ij}^{\zeta}(x) n_j = \bar{p}_i(x) \qquad \forall x \in S_t \tag{۱۳}$$

کرنش ذاتی ماکروسکوپی به خواص الیاف، ماتریس و فصل مشترک آن‌ها و همچنین یک متغیر حالت وابسته است.

$$\mu_{ij}^{\zeta}(x) = \mu_{ij}^{\zeta}\left(\sigma_{ij}^{\zeta}, \varepsilon_{ij}^{\zeta}, \phi^c\right) \tag{۱۴}$$

به طور کلی، با اعمال شرایط مرزی مناسب مانند شرایط مرزی تناوبی می‌توان از میانگین‌گیری حجمی روی دامنه RVE برای محاسبه مقادیر ماکروسکوپی تنش و کرنش استفاده کرد. در نتیجه، تنش و کرنش ماکروسکوپی از میانگین مقادیر متناظر در RVE به دست می‌آیند و رابطه رفتاری مؤثر ماده نیز بین این کمیت‌ها برقرار می‌شود. همچنین شرط هیل – مندل بیان می‌کند که انرژی کرنش متوسط در مقیاس میکرو و ماکرو برابر است[۴۴].

$$\varepsilon_{ij}^{\zeta}(x) = \frac{1}{|Y|}\int_Y \varepsilon_{ij}^{\zeta}(x,y)\, dY \tag{۱۵}$$

$$\sigma_{ij}^{\zeta}(x) = \frac{1}{|Y|}\int_Y \sigma_{ij}^{\zeta}(x,y)\, dY \tag{۱۶}$$

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \langle \varepsilon_{ij} \rangle \tag{۱۷}$$

$$\bar{\sigma}_{ij} = \langle \sigma_{ij} \rangle \tag{۱۸}$$

$$\bar{\sigma}_{ij} = C^*_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{kl} \tag{۱۹}$$

$$\langle \sigma_{ij}\varepsilon_{ij} \rangle = \bar{\sigma}_{ij}\bar{\varepsilon}_{ij} \tag{۲۰}$$

لازم به ذکر است که روابط (۶) تا (۲۰) به‌منظور تشریح مبانی نظری چارچوب همگن‌سازی چندمقیاسی و مفهوم جداسازی مقیاس‌ها ارائه شده‌اند. این روابط، پایه ریاضی لازم برای استخراج رفتار مؤثر و روابط ساختاری معادل حجم نماینده (RVE) را فراهم می‌کنند. با این حال، در پژوهش حاضر، خواص الاستیک مؤثر مورد استفاده در شبیه‌سازی‌های مقیاس ماکرو در نهایت از طریق روش همگن‌سازی موری–تاناکا–اشلبی و با بهره‌گیری از نتایج تحلیل‌های عددی حجم نماینده انجام‌شده در نرم‌افزار آباکوس استخراج شده‌اند.

۴-۵- همگن‌سازی برای نانوذرات کروی

تنسور اشلبی تابعی از نسبت ابعادی ناخالصی و ضریب پواسون ماتریس است و برای تحلیل اثر یک ذره کروی در ماتریس همسانگرد استفاده می‌شود. از این تنسور برای تعریف تنسور قطبش استفاده می‌شود[۴۲].

$$S_{ijkl} = \alpha(\nu_m)\delta_{ij}\delta_{kl} + \beta(\nu_m)\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \tag{۲۱}$$

روش موری - تاناکا تخمینی از تنسور سفتی مؤثر کامپوزیت ارائه می‌دهد که به صورت یک تنسور مرتبه چهارم بیان می‌شود[۴۱]. این فرم در مدل‌سازی ریزمکانیکی کامپوزیت‌ها، به‌ویژه نانوکامپوزیت‌ها، بسیار مفید است زیرا امکان توصیف رفتار الاستیک ناهمسانگرد کلی ماده را فراهم می‌کند.

$$C^* = C_m + v_p(C_p - C_m): \left[I + (1 - v_p)P:(C_p - C_m)\right]^{-1} \quad (۲۲)$$

همچنین روابط بسته‌ای برای محاسبه مدول حجمی مؤثر و مدول برشی مؤثر در کامپوزیت‌های حاوی ذرات کروی ارائه شده است. با استفاده از این دو کمیت می‌توان ثوابت مهندسی مؤثر مانند مدول یانگ و ضریب پواسون مؤثر را برای ماده همسانگرد استخراج کرد.

$$K^* = K_m + \frac{v_p\,(K_p - K_m)}{1 + (1 - v_p) + \frac{(K_p - K_m)}{(K_m - \frac{3}{4}G_m)}} \quad (۲۳)$$

$$G^* = G_m + \frac{v_p\,(G_p - G_m)}{1 + (1 - v_p) + \frac{(G_p - G_m)}{(G_m + F)}} \quad \& \quad F = G_m \frac{9K_m + 8G_m}{6(K_m + 2G_m)} \quad (۲۴)$$

$$E^* = \frac{9K^*G^*}{3K^* + G^*} \quad \& \quad v^* = \frac{3K^* - 2G^*}{2(3K^* + G^*)} \quad (۲۵)$$

در نهایت، برای یک RVE همسانگرد با نانوذرات کروی، خواص مؤثر الاستیک به صورت مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون معادل ماده همگن بیان می‌شوند.

$$E^* = E,\ G^* = G \text{ and } v^* = v \quad (۲۶)$$

۵- مواد و روش

در جدول ۱، E و v به‌ترتیب نمایانگر خصوصیات مکانکی برای شبیه سازی رشد ترک میباشد که زیرنویس‌های p و m و i به ترتیب به فاز ذره (یا الیاف) و ماتریس و اینترفیس اشاره دارند. همچنین، σ_m^t مقاومت کششی ماتریس و G_m نرخ آزادسازی انرژی برای رشد ترک در ماتریس را نشان می‌دهد[۱۹].

فصل مشترک ذره- ماتریس یا الیاف- ماتریس با استفاده از مدل چسبنده شبیه‌سازی شده است که در آن رفتار مکانیکی از طریق قانون کشش–جدایش دوخطی بیان می‌شود. این پژوهش، رفتار فصل مشترک ذره–ماتریس با استفاده از مدل ناحیه چسبنده (CZM) مبتنی بر قانون کشش–جدایش دوخطی مدل‌سازی شد. در این مدل، پاسخ اولیه فصل مشترک الاستیک خطی بوده و آغاز آسیب بر اساس معیار تنش بیشینه تعریف گردید. پس از آن، تکامل آسیب مطابق قانون دوخطی کشش–جدایش تا جدایش کامل فصل مشترک ادامه یافت. مقادیر تمامی پارامترهای مورد استفاده در مدل، شامل سختی اولیه، مقاومت‌های نرمال و برشی و انرژی شکست فصل مشترک، در جدول ۲ ارائه شده‌اند [۱۹و۴۵].

جدول ۱- خواص و ویژگی‌های مواد برای کامپوزیت سیلیکا/اپوکسی [۲۴،۱۹]

Property	E_P GPa	V_p	E_m GPa	ν_m	σ_m^t MPa	G_m J/m²
Value	70	0.17	3.5	0.4	121	90

جدول ۲- پارامترهای مدل ناحیه چسبنده (CZM) مورد استفاده در شبیه‌سازی فصل مشترک ذره- ماتریس [۱۹و۴۵].

Property	K MPa/mm	t_s^0 MPa	t_n^0 MPa	G_i J/m²
Value	5×10^7	53	53	10

این رابطه، جابجایی در فصل مشترک را به بردار تنش اعمال‌شده مرتبط می‌کند. در این مدل، K بیانگر سختی اولیه ناحیه چسبنده، t_s^0 و t_n^0 به‌ترتیب مقاومت نرمال و برشی فصل مشترک در آغاز آسیب، و G_c انرژی شکست یا انرژی لازم برای جدایش کامل فصل مشترک هستند.

لازم به ذکر است که پارامترهای مدل ناحیه چسبنده شامل استحکام نرمال و برشی فصل مشترک و همچنین انرژی شکست بین‌سطحی، از طریق کالیبراسیون مستقیم تجربی در پژوهش حاضر تعیین نشده‌اند، بلکه بر اساس مقادیر گزارش‌شده در مطالعات تجربی و عددی پیشین برای سامانه‌های سیلیکا/اپوکسی و کامپوزیت‌های ذره‌ای مشابه انتخاب شده‌اند.

انتخاب این پارامترها با هدف بازنمایی واقع‌بینانه رفتار جدایش بین‌سطحی و امکان مقایسه نتایج با پژوهش‌های مرجع انجام شده است. از آنجا که هدف اصلی این پژوهش توسعه و ارزیابی یک چارچوب چندمقیاسی مبتنی بر CZM و XFEMبرای مطالعه مکانیزم‌های شکست بوده است، انجام

برنامه آزمایشگاهی مستقل برای استخراج پارامترهای چسبنده خارج از دامنه تحقیق حاضر قرار داشته است.

۶- مدل‌سازی و شبیه‌سازی رشد ترک

مدل‌سازی و شبیه‌سازی رشد ترک در مواد کامپوزیتی در این پژوهش با استفاده از یک رویکرد چندمقیاسی شامل سه مقیاس میکرو، مزو و ماکرو انجام می‌شود. در تمامی مدل‌ها، تنها شرط تماس مورد استفاده، مدل تماس چسبنده است که برای شبیه‌سازی فرآیندهای چسبندگی، آسیب و جدایش بین فازها به‌کار گرفته می‌شود. این رویکرد امکان تحلیل دقیق مکانیزم‌های شکست، به‌ویژه جدایش بین تقویت‌کننده و ماتریس، را فراهم می‌کند.

۶-۱- مقیاس میکرو

در مقیاس میکرو، مدل‌سازی با استفاده از حجم نماینده (RVE)و در قالب یک مدل سلول واحد (Unit Cell) انجام شده است. در این مدل، برهم‌کنش بین ذرات سیلیکا و ماتریس اپوکسی با استفاده از مدل ناحیه چسبنده مبتنی بر قانون دوخطی کشش–جدایش شبیه‌سازی شده است. این مدل قادر است رفتار اولیه چسبندگی، آغاز آسیب و فرآیند جدایش تدریجی در فصل مشترک ذره–ماتریس را با دقت مناسبی توصیف کند. نتایج حاصل از تحلیل کشش تک‌محوره در این مقیاس برای استخراج خواص مکانیکی مؤثر شامل مدول الاستیسیته معادل، استحکام مؤثر، تنش و کرنش شکست، مسیر آغاز ترک و انرژی شکست مورد استفاده قرار گرفته‌اند. همچنین، خواص مؤثر استخراج‌شده از تحلیل RVE به‌عنوان ورودی برای تعیین رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت در مقیاس‌های بالاتر مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

۶-۲- مقیاس مزو

در مقیاس مزو، مدل‌ها دارای ابعاد بزرگ‌تری هستند و تمرکز تحلیل بر برهم‌کنش میان چندین ذره یا تقویت‌کننده در محیط ماتریس قرار دارد. در این مرحله، داده‌های به‌دست‌آمده از مقیاس میکرو برای تعریف دقیق‌تر خواص بین‌سطحی و مکانیزم‌های شکست در مدل‌های مزو به کار گرفته می‌شوند. در این مقیاس نیز تمامی فصل‌های مشترک تنها با استفاده از مدل چسبنده شبیه‌سازی می‌شوند. تحلیل‌های انجام‌شده در این سطح شامل بررسی مسیر و پایداری رشد ترک، تأثیر چسبندگی و انرژی جدایش فصل مشترک، و نقش کسر حجمی و الگوی توزیع ذرات بر رفتار شکست ماده است.

۶-۳- مقیاس ماکرو

در مقیاس ماکرو، رشد ترک با استفاده از روش اجزای محدود توسعه‌یافته در نرم‌افزار آباکوس شبیه‌سازی می‌شود. در این مرحله، خواص مؤثر و پارامترهای بین‌سطحی استخراج‌شده از مقیاس‌های میکرو و مزو به‌عنوان ورودی مدل ماکرو مورد استفاده قرار می‌گیرند. روش XFEM امکان مدل‌سازی آغاز ترک، رشد تدریجی و تغییر مسیر ترک را بدون نیاز به بازشبکه‌بندی فراهم می‌کند. در این مطالعه، رفتار مکانیکی یک کامپوزیت دو فازی تحت بارگذاری کششی تک‌محوره در شرایط کرنش صفحه‌ای (Plane Strain) مورد بررسی قرار می‌گیرد. در مدل‌سازی اولیه، تقویت‌کننده‌ها به‌صورت ذرات دایره‌ای با توزیع یکنواخت در ماتریس قرار داده شده‌اند و نسبت ابعادی آن‌ها در دو راستای اصلی برابر با یک فرض شده است. برای حفظ شرایط تقارن و یکنواختی در تحلیل، دامنه محاسباتی به‌عنوان حجم نماینده (RVE) به شکل مربعی در نظر گرفته می‌شود.

بارگذاری به صورت کشش تک‌محوره اعمال شده و در نتیجه آن، پاسخ تنش–کرنش مؤثر کامپوزیت استخراج می‌گردد. تنش کلی در راستای بارگذاری (جهت x) از طریق انتگرال‌گیری نیروی کششی سطحی بر روی سطح جانبی RVE محاسبه می‌شود. این تنش معادل، مطابق رابطه زیر تعریف شده است [۱۸]:

$$\sigma_1 = \frac{1}{2b_c}\int_{-b_c}^{b_c} [T_1]_{x_1=a_c}\, dx_2 \qquad (۲۷)$$

این فرمولاسیون، تنش میانگین وارد بر سطح مقابل بارگذاری را به‌دست می‌دهد که در واقع بیانگر تنش مؤثر کلی در کل حجم نماینده (RVE) است. به‌طور همزمان، کرنش کلی در راستای بارگذاری از طریق نسبت جابجایی کل اعمال‌شده به طول اولیه دامنه محاسباتی در همان راستا محاسبه می‌شود [۱۸]:

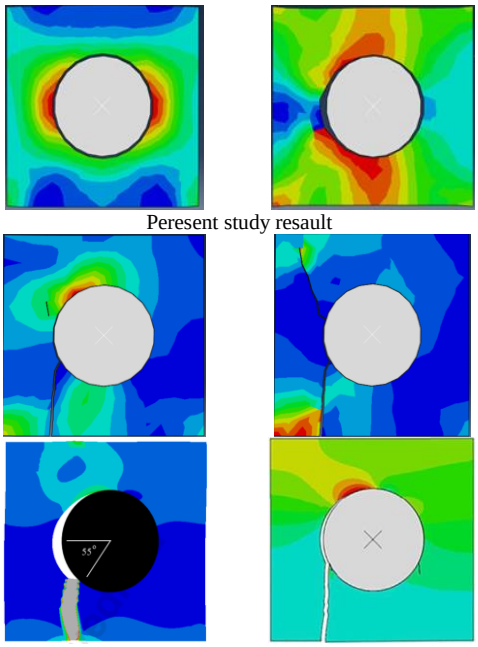
$$\varepsilon_1 = \frac{\Delta_1}{2a_c} \qquad (۲۸)$$

علاوه بر مکانیزم‌های آسیب، مدل‌های میکرومکانیکی حاضر امکان بررسی مکانیزم‌های تقویت‌کننده ناشی از حضور

نانوذرات سیلیکا را نیز فراهم می‌کنند. به دلیل سختی بالاتر ذرات نسبت به ماتریس اپوکسی، بخشی از بار اعمالی از ماتریس به ذرات منتقل شده و در نتیجه توزیع تنش در ریزساختار تغییر می‌کند. این انتقال بار موجب افزایش سختی مؤثر کامپوزیت و کاهش تمرکز تنش در ماتریس می‌شود. همچنین، حضور ذرات با ایجاد انحراف مسیر ترک، کندشدگی نوک ترک و افزایش طول مسیر انتشار، انرژی لازم برای رشد ترک و در نتیجه چقرمگی شکست را افزایش می‌دهد. کیفیت اتصال بین‌سطحی ذره-ماتریس نیز نقش تعیین‌کننده‌ای در این فرآیند دارد؛ به‌گونه‌ای که چسبندگی مناسب انتقال مؤثر تنش و تأخیر در آغاز آسیب را فراهم می‌کند، در حالی که ضعف فصل مشترک می‌تواند موجب جدایش زودهنگام و کاهش اثر تقویتی نانوذرات شود. در این پژوهش، ماتریس اپوکسی و نانوذرات سیلیکا به‌صورت مواد الاستیک خطی همسانگرد مدل‌سازی شده‌اند. هدف اصلی تحلیل ریزمقیاس، بررسی آغاز و گسترش آسیب ناشی از جدایش بین‌سطحی و ترک‌خوردگی ماتریس در چارچوب ترکیبی مدل ناحیه چسبنده (CZM) و روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) بوده است. ازاین‌رو، رفتار غیرخطی ماده به‌طور صریح در مدل لحاظ نشده و فرآیند شکست از طریق تکامل آسیب در ناحیه چسبنده و رشد ترک در ماتریس شبیه‌سازی شده است. با توجه به کوچک بودن کرنش‌های متناظر با آغاز آسیب و غالب بودن رفتار الاستیک پیش از شکست، استفاده از مدل الاستیک خطی برای هر دو فاز، فرضی متداول و قابل قبول در مطالعات ریزمکانیکی محسوب می‌شود.

۷- اعتبارسنجی تکنیک مدل‌سازی

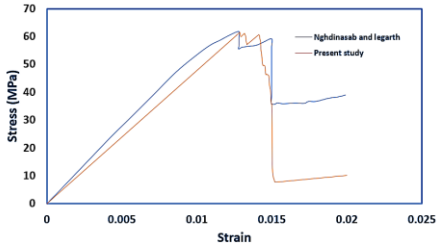
برای اعتبارسنجی رویکرد مدل‌سازی، ابتدا نتایج حاصل از این مطالعه با داده‌های گزارش‌شده توسط لگارث و نقدی نسب [۱۸-۱۹] در زمینه جدایش فصل مشترک الیاف-ماتریس و ترک‌خوردگی ماتریس در یک حجم نماینده (RVE) مقایسه شده است. در بررسی های انجام شده، شکست بین‌فازی الیاف–ماتریس با استفاده از مدل ناحیه چسبنده شبیه‌سازی شده است که قادر است رفتار غیرخطی فصل مشترک و فرآیند جدایش تدریجی را بازنمایی کند. برای مدل‌سازی شکست ماتریس نیز از روش اجزای محدود استفاده شده است. آغاز هر دو مکانیزم آسیب (جدایش بین‌فازی و ترک‌خوردگی ماتریس) با ایجاد تغییرات ناگهانی در منحنی تنش–کرنش قابل تشخیص است (شکل ۶). همان‌طور که مشاهده می‌شود، پس از فعال‌شدن مکانیزم‌های شکست، استحکام مؤثر ماده کاهش یافته و در ادامه، شیب منحنی تنش–کرنش نسبت به بخش اولیه کمتر می‌شود که بیانگر نرم‌شدگی تدریجی سازه است (شکل ۵). در شبیه سازی ماتریس اپوکسی ایزوتروپیک در نظر گرفته شده است. خواص الاستیک مورد استفاده برای این ماده عبارتند از: $E = 4\,\mathrm{GPa}$ و $\nu = 0.33$، که در آن Eمدول الاستیسیته و νنسبت پواسون را نشان می‌دهند [۱۸].



شکل ۵- اعتبارسنجی در مقایسه با نتایج گزارش‌شده توسط مراجع[۱۸،۱۹]

کسر حجمی کلی برای تقویت‌کننده ۲۰٪ است (شعاع ذرات $R = 1.26\,\mu\mathrm{m}$)، در حالی که طول و ارتفاع المان حجمی نماینده (RVE) هر دو برابر با $5\,\mu\mathrm{m}$ هستند. پارامترهای مورد نیاز برای مدل‌سازی فصل مشترک (CZM) عبارتند از: $\sigma_{\max} = 60\,\mathrm{MPa}$ و $\delta_{n1} = \delta_{t1} = 0.008\,\mu\mathrm{m}$. علاوه بر این، شکست ماتریس با استفاده از روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) مدل‌سازی می‌شود که پارامترهای آن $\sigma_{\max} = 100\,\mathrm{MPa}$ و $\delta_{n1} = \delta_{t1} = 0.008\,\mu\mathrm{m}$است[۱۸]. در مطالعه حاضر، RVE شامل یک حوزه مربعی است که یک ذره دایره‌ای در مرکز آن قرار دارد. با توجه به تقارن کامل هندسی این

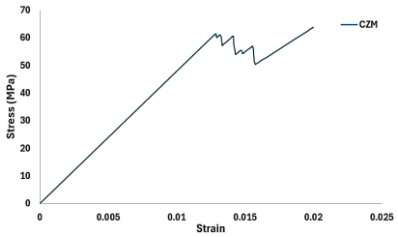
پیکربندی (تقارن نسبت به هر دو صفحه میانی)، اعمال شرایط مرزی متقارن در لبه‌های RVE کاملاً توجیه‌پذیر است. تحت بارگذاری همگن، انتظار می‌رود میدان‌های جابجایی و تنش نسبت به محورهای میانی هندسی RVE متقارن باقی بمانند. در این مطالعه، یک RVE شامل یک ذره کروی قرارگرفته درون ماتریس پلیمری مورد تحلیل قرار گرفت. یک بارگذاری یکنواخت عرضی به مرز سمت راست RVE اعمال شد (شکل ۶).



شکل ۶- نمودار نیرو- جابجایی برای یک RVE با استفاده از روش ترکیبی XFEM–CZM

شکست سازه‌ای ابتدا با جدایش فصل مشترک آغاز شد که در فصل مشترک ذره–ماتریس، با استفاده از مدل ناحیه چسبنده (CZM) مدل‌سازی گردید. با افزایش بار اعمال‌شده، تنش‌های برشی و نرمال فصل مشترک از استحکام چسبنده فراتر رفته و منجر به جدایش تدریجی فصل مشترک شد (شکل‌های ۷–۵). همان‌گونه که در شکل‌های ۵ و ۶ مشاهده می‌شود، روند کلی منحنی‌های تنش–کرنش و توالی وقوع مکانیزم‌های آسیب در مدل حاضر، تطابق بسیار مناسبی با نتایج گزارش‌شده توسط لگارث و نقدی‌نسب [۱۹-۱۸] دارد. در هر سه مطالعه، ابتدا جدایش تدریجی فصل مشترک ذره–ماتریس آغاز شده و سپس ترک در ماتریس گسترش می‌یابد که این موضوع نشان‌دهنده توانایی چارچوب ترکیبی مدل ناحیه چسبنده (CZM) و روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM)در بازنمایی صحیح فرآیند شکست است.

در ناحیه الاستیک، مدول الاستیسیته پیش‌بینی‌شده توسط مدل حاضر تنها حدود ۱/۸ درصد با داده‌های مرجع اختلاف دارد که بیانگر انطباق مناسب پاسخ اولیه مدل با نتایج مرجع است. همچنین، در مرحله آغاز آسیب پیشرونده، تنش بیشینه پیش‌بینی‌شده برابر با ۶۱/۲ مگاپاسکال است، در حالی که مقدار گزارش‌شده در مطالعه مرجع ۶۲/۱ مگاپاسکال بوده و اختلاف نسبی بین دو مقدار تنها ۱/۴۵ درصد است. این میزان اختلاف اندک، دقت مناسب مدل پیشنهادی در پیش‌بینی رفتار مکانیکی و فرآیند آغاز شکست را تأیید می‌کند. اختلاف‌های جزئی باقی‌مانده را می‌توان به تفاوت در شرایط مرزی، تراکم شبکه، ابعاد حجم المان نماینده(RVE) ، پارامترهای مدل ناحیه چسبنده و نحوه مدل‌سازی رشد ترک نسبت داد. با وجود این تفاوت‌ها، انطباق مناسب روند منحنی‌ها، مقادیر کمی و توالی مکانیزم‌های شکست، اعتبار چارچوب مدل‌سازی ارائه‌شده را به‌خوبی تأیید می‌کند.

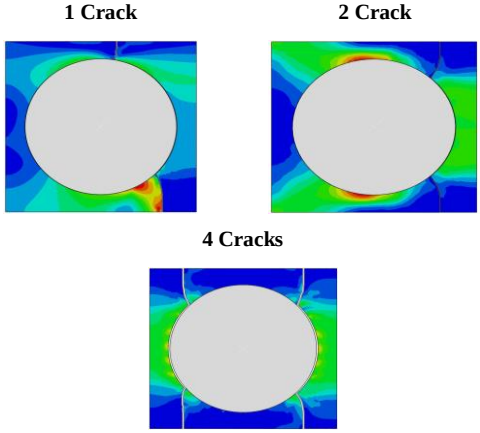


شکل ۷- نمودار تنش - کرنش برای CZM

۸- بحث و نتیجه گیری

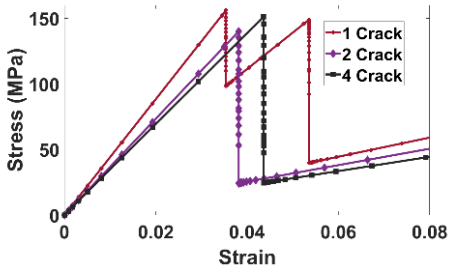
۸-۱- جدایش بین‌سطحی و ترک ماتریس در شکست RVE

با توجه به نقش کلیدی جدایش بین‌سطحی و ترک‌خوردگی ماتریس در فرآیند آغاز و گسترش شکست نانوکامپوزیت‌ها، این دو مکانیزم به‌طور هم‌زمان مورد بررسی قرار گرفتند. در مراحل اولیه بارگذاری، آسیب ابتدا به‌صورت جدایش تدریجی در فصل مشترک نانوذره–ماتریس آغاز می‌شود.



شکل ۸- شبیه‌سازی انتشار ترک در نانوکامپوزیت سیلیکا/اپوکسی در RVE تحت شرایط مرزی شکل ۳

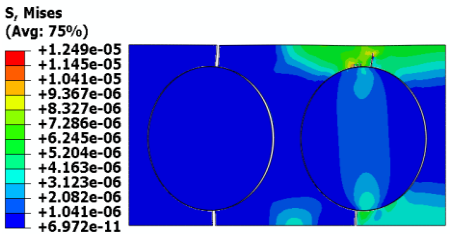
با تکمیل فرآیند جدایش و افزایش تمرکز تنش در نواحی مجاور، ترک‌خوردگی در ماتریس فعال شده و رشد آن با استفاده از روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) شبیه‌سازی گردید. این رویکرد امکان بررسی برهم‌کنش میان آسیب بین‌سطحی و رشد ترک ماتریس و همچنین تأثیر آن‌ها بر رفتار شکست نهایی نانوکامپوزیت را فراهم می‌کند.



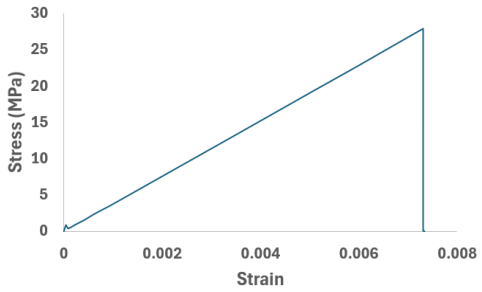
۹- منحنی‌های تنش-کرنش برای سلول واحد برای پیش ترک های مختلف

اگرچه ترک‌های ماتریس به‌صورت مستقل از فصل مشترک گسترش می‌یابند، اما مسیر انتشار آن‌ها تحت تأثیر شرایط بین‌سطحی، از جمله چسبندگی و انرژی شکست، قرار دارد. نتایج نشان می‌دهد که میزان جدایش بین‌سطحی و نحوه توزیع ترک‌های ماتریس نقش تعیین‌کننده‌ای در مسیر رشد ترک، زمان شکست و انرژی جذب‌شده دارند؛ به‌طوری‌که جدایش بین‌سطحی آغازگر آسیب و ترک‌خوردگی ماتریس مکانیزم غالب در گسترش شکست نهایی است. در این راستا، مدل ناحیه چسبنده (CZM) با استفاده از قانون کشش–جدایش، آغاز و تکامل تدریجی آسیب بین‌سطحی و کاهش ظرفیت انتقال تنش در فصل مشترک نانوذره–ماتریس را به‌خوبی بازنمایی می‌کند. همچنین، شکل‌های ۸ و ۹ تأثیر تعداد ترک‌های اولیه (یک، دو و چهار ترک) را بر منحنی‌های تنش–کرنش RVE و روند تکامل ترک‌ها نشان می‌دهند. با افزایش تعداد ترک‌های اولیه، شیب منحنی تنش-کرنش کاهش یافته و سختی مؤثر و مدول الاستیک معادل RVE در اثر افزایش تمرکز تنش و تسریع فرآیند آسیب‌زایی کاهش می‌یابد؛ رفتاری که با نتایج تجربی کامپوزیت‌های واقعی نیز همخوانی دارد.

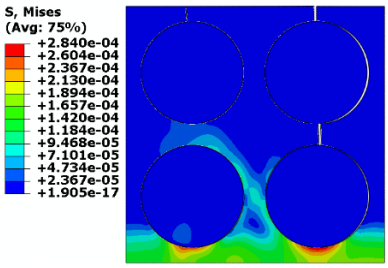
در مدل خوشه‌ای (شکل‌های ۱۰ تا ۱۳)، تکامل آسیب تحت بارگذاری کششی با استفاده از CZM برای فصل مشترک و XFEMبرای ترک‌خوردگی ماتریس بررسی شده است. در مراحل اولیه، رفتار سیستم عمدتاً الاستیک بوده و توزیع تنش تقریباً یکنواخت است. با افزایش بار، تمرکز تنش در اطراف ذرات موجب آغاز جدایش بین‌سطحی، کاهش سختی مؤثر و سپس فعال شدن ترک‌خوردگی ماتریس می‌شود. ترک‌ها تحت تأثیر میدان تنش و آرایش ذرات، مسیر خود را تغییر داده و عمدتاً در نواحی با تمرکز تنش بالا گسترش می‌یابند. در مراحل نهایی بارگذاری، برهم‌کنش جدایش بین‌سطحی و ترک‌خوردگی ماتریس موجب پیچیده‌تر شدن مسیر ترک، افزایش رفتار غیرخطی و کاهش ظرفیت باربری شده و در نهایت شکست نهایی از اثر متقابل این دو مکانیزم حاصل می‌شود.



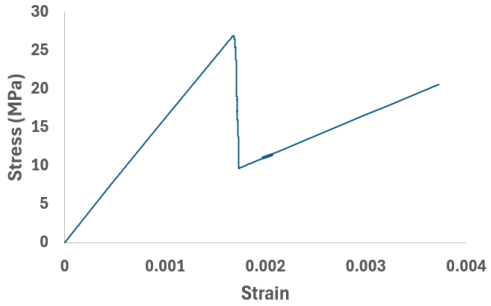
شکل ۱۰- شبیه‌سازی انتشار ترک در نانوکامپوزیت سیلیکا/اپوکسی در RVE تحت شرایط مرزی حاوی دو پارتیکل



شکل ۱۱- نمودار تنش-کرنش مربوط به مدل RVE با دو پارتیکل تحت بارگذاری کششی



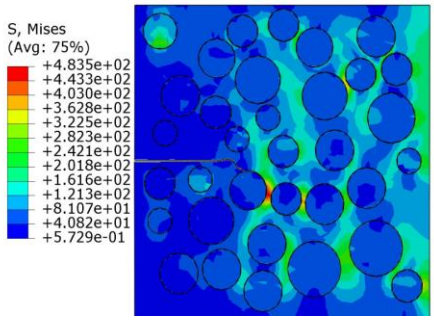
شکل ۱۲- شبیه‌سازی انتشار ترک در نانوکامپوزیت سیلیکا/اپوکسی در RVE تحت شرایط مرزی حاوی ۴ پارتیکل



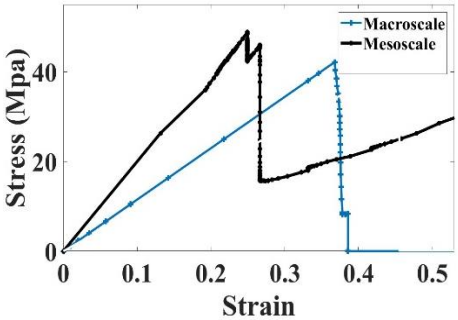
شکل ۱۳- نمودار تنش–کرنش مربوط به مدل RVE با چهار پارتیکل تحت بارگذاری کششی

۸-۲- مقیاس مزو (Meso-Scale)

در مقیاس مزو، با کسر حجمی ۳۱/۱۵ درصداز تقویت‌کننده‌ها، آغاز ترک به‌طور محسوسی به تأخیر افتاده و رفتار شکست عمدتاً تحت تأثیر شرایط تماس بین‌سطحی قرار دارد. در این میان، افزایش تقویت‌کننده موجب بهبود اولیه مقاومت می‌شود، اما پاسخ نهایی شکست همچنان توسط مکانیزم‌های ریزساختاری نظیر جدایش فصل مشترک، انحراف مسیر ترک و کندشدگی نوک ترک کنترل می‌گردد.



شکل ۱۴- شبیه‌سازی انتشار ترک در مقیاس مزو

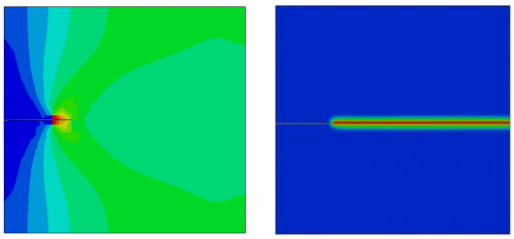


۱۵- منحنی‌های تنش-کرنش برای مدل ماکرو و مزو (تماس چسب بین ذرات و ماتریس)

در این مطالعه، برای بازنمایی واقع‌بینانه‌تر رشد ترک، از آرایش تصادفی و خوشه‌ای ذرات بر اساس مدل تان و ماتینز [۳۰] استفاده شده است. همچنین رفتار فصل مشترک با استفاده از مدل ناحیه چسبنده (CZM) شبیه‌سازی شده است. نتایج نشان می‌دهد که ناهمگنی ناشی از خوشه‌بندی ذرات با تغییر میدان تنش موضعی، موجب پیچیده‌تر شدن مسیر ترک و افزایش نقش توپولوژی تصادفی در مقاومت کلی ماده در برابر شکست می‌شود. نتایج مربوط به رشد ترک در مدل مزو در شکل‌های ۱۴ و ۱۵ ارائه شده است.

۸-۳- مقیاس ماکرو (Macro-Scale)

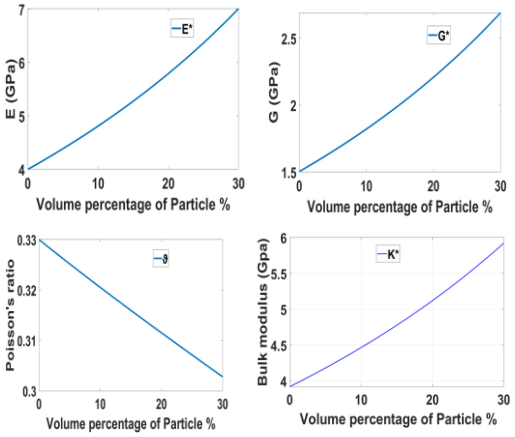
برای مدل‌سازی ماکرو، خواص مکانیکی همگن‌شده کامپوزیت بر اساس مدل موری–تاناگا–اشلبی و با در نظر گرفتن کسر حجمی ۲/۳ درصد تقویت‌کننده محاسبه شد. مدول یانگ مؤثر برابر ۳/۷۵ GPa است که بیانگر سفتی مناسب ماده است (شکل ۱۵). همچنین استحکام کششی نهایی ۲۰۵ MPa و انرژی شکست ۵۹۵J/m² با استفاده از مدل زمانیان وهمکاران [۲۴] به‌دست آمده است که به‌ترتیب نشان‌دهنده ظرفیت مناسب تحمل بار و توانایی مطلوب در جذب انرژی و مقاومت در برابر گسترش ترک می‌باشد. بر اساس نتایج ارائه‌شده در جدول ۱، انرژی شکست اپوکسی خالص برابر ۹۰J/m² در نظر گرفته شده است.



شکل ۱۶- شبیه‌سازی انتشار ترک در مقیاس ماکرو.

در چارچوب چندمقیاسی حاضر، اطلاعات استخراج‌شده از تحلیل‌های مقیاس میکرو و مزو به‌صورت سلسله‌مراتبی به مدل ماکرو منتقل شدند. در مقیاس میکرو، تحلیل حجم المان نماینده (RVE) امکان استخراج خواص مؤثر الاستیک، تنش و کرنش شکست و همچنین ارزیابی نقش جدایش بین‌سطحی ذره–ماتریس در آغاز آسیب را فراهم کرد. در مقیاس مزو نیز تأثیر توزیع فضایی و خوشه‌بندی نانوذرات، برهم‌کنش ترک با

ذرات، انحراف مسیر ترک و تغییر میدان تنش بر رفتار شکست مورد بررسی قرار گرفت.



شکل ۱۷- تأثیر کسر حجمی ذرات بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها.

سپس، با استفاده از روش همگن‌سازی موری–تاناکا–اشلبی، خواص معادل شامل مدول یانگ، استحکام کششی و انرژی شکست استخراج و به‌عنوان پارامترهای ورودی مدل ماکرو مبتنی بر روش اجزای محدود توسعه‌یافته (XFEM) مورد استفاده قرار گرفتند. این انتقال اطلاعات بین مقیاس‌ها موجب شد اثرات ریزساختاری، شامل مکانیزم‌های انتقال بار، جدایش بین‌سطحی، انحراف مسیر ترک و توزیع ناهمگن تنش، به‌صورت غیرمستقیم در پاسخ سازه‌ای مقیاس ماکرو منعکس شوند. نتایج نشان داد که چارچوب چندمقیاسی پیشنهادی قادر است ارتباط مؤثری میان رفتار ریزساختاری و پاسخ مکانیکی سازه برقرار کرده و رفتار شکست کامپوزیت را با دقت مناسبی پیش‌بینی کند (شکل ۱۶).

با این حال، در شرایط واقعی، افزایش کسر حجمی ذرات به‌ویژه فراتر از ۱۵ تا ۲۰ درصد اغلب با افزایش احتمال کلوخگی همراه است (شکل ۱۵). این تجمعات سبب اختلال در یکپارچگی ریزساختاری شده و باعث شکل‌گیری ناحیه‌های ضعیف، تمرکز تنش و ناهمگنی موضعی می‌شوند. از دیدگاه مکانیکی، کلوخگی معمولاً به‌عنوان مکان‌های بالقوه آغاز آسیب و شکست عمل کرده و می‌توانند اثرات تقویتی پیش‌بینی‌شده را به میزان قابل توجهی کاهش دهند.

به‌طور کلی، اگرچه افزایش کسر حجمی ذرات می‌تواند در شرایط توزیع بهینه بهبود چشمگیری در خواص مکانیکی ایجاد کند، اما رفتار واقعی کامپوزیت به شدت تحت تأثیر کیفیت پراکنش ذرات و میزان تجمع آن‌ها قرار دارد. تحلیل تنش–کرنش در مقیاس‌های مزو و ماکرو نشان می‌دهد(شکل ۱۵و ۱۶) که مدل تماس چسبی (CZM) در بازنمایی رفتار واقعی کامپوزیت نقش کلیدی دارد.

در این مدل، استحکام بیشینه بین ۴۵ تا ۴۷ مگاپاسکال به دست آمد و پس از آن، ماده وارد مرحله نرم‌شوندگی تدریجی شد. این رفتار نرم‌شوندگی پس از پیک، مستقیماً با دباندینگ تدریجی فصل مشترک مطابقت دارد.

۱۰- نتیجه گیری

در این پژوهش، رفتار شکست کامپوزیت‌های پلیمری تقویت‌شده با ذرات کروی از طریق یک چارچوب چندمقیاسی مبتنی بر روش‌های XFEM و CZM مورد بررسی قرار گرفت. با مدل‌سازی هم‌زمان جدایش بین‌سطحی ذره–ماتریس و ترک‌خوردگی ماتریس، امکان تحلیل واقع‌بینانه‌تر فرآیند آغاز، رشد و گسترش آسیب در مقیاس‌های مختلف فراهم شد.

نتایج ریزمقیاس نشان داد که خواص فصل مشترک نقش تعیین‌کننده‌ای در مسیر انتشار ترک، میزان جذب انرژی و استحکام نهایی کامپوزیت دارند و جدایش بین‌سطحی به‌عنوان مکانیزم آغازگر آسیب عمل می‌کند.

همچنین، روش CZM توانایی مناسبی در شبیه‌سازی تدریجی تخریب فصل مشترک داشته و XFEM بدون نیاز به بازتولید مش، مسیر رشد ترک در ماتریس را با دقت مطلوب پیش‌بینی می‌کند.

نتایج مزومقیاس نشان داد که برهم‌کنش میان ذرات، انحراف مسیر ترک، پیچیدگی هندسه ترک و توزیع موضعی تنش‌ها تأثیر قابل‌توجهی بر فرآیند تکامل آسیب دارند. علاوه بر این، افزایش تعداد ترک‌های اولیه موجب کاهش سختی مؤثر، افت مدول الاستیک معادل و تسریع رشد آسیب در ساختار می‌شود. در مقیاس کلان نیز مشخص شد که با وجود پیچیدگی مکانیزم‌های شکست در سطوح پایین‌تر، رفتار مؤثر کامپوزیت را می‌توان از طریق فرآیند همگن‌سازی با دقت مناسبی به مقیاس سازه منتقل کرد و پاسخ مکانیکی کلی را پیش‌بینی نمود.

به‌طور کلی، نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که کیفیت فصل مشترک، میزان کسر حجمی ذرات، انحراف ترک و برهم‌کنش میان جدایش بین‌سطحی و ترک‌خوردگی ماتریس از مهم‌ترین

عوامل کنترل‌کننده چقرمگی و مقاومت شکست کامپوزیت‌های ذره‌ای هستند.

چارچوب چندمقیاسی ارائه‌شده، با ترکیب قابلیت‌های XFEMوCZM ، ابزاری کارآمد برای تحلیل، طراحی و بهینه‌سازی کامپوزیت‌های نانوذره‌ای فراهم می‌کند و می‌تواند به‌عنوان بستری مناسب برای توسعه مدل‌های پیشرفته‌تر و طراحی مواد با عملکرد مکانیکی بهبودیافته مورد استفاده قرار گیرد.

تعارض منافع

نویسندگان اعلام می‌کنند که هیچ‌گونه تعارض منافع مالی، تجاری یا شخصی ندارند که بتواند بر انجام پژوهش، نویسندگی یا انتشار این مقاله تأثیرگذار باشد.

دسترسی به داده‌ها

هیچ داده‌ای در پژوهش توصیف‌شده در این مقاله مورد استفاده قرار نگرفته است.

۱۲- مراجع

[1] Zhao LB, Gong Y, Zhang JY (2019) A survey on delamination growth behavior in fiber reinforced composite laminates. Acta Aeronaut Astronaut Sin 40(522509): 10-7527.

[2] Changfang Z, Pueh LH, Lim GK, Jianlin Z, Kebin Z, Zhendong Z, Jie R, Guigao L (2022) Preparation process and compression mechanics of carbon fiber reinforced plastics negative Poisson's ratio structure (CFRP+NPRS). Compos Struct 292: 115667.

[3] Zhao C, Zhou Z, Zhang K, Zhu H, Zhong J, Sun C, Ren J, Le G (2021) Experimental study on tensile mechanics of arrow combination structure with carbon fiber–epoxy resin composite. Arab J Sci Eng 46: 2891-2900.

[4] García IG, Paggi M, Mantič V (2014) Fiber-size effects on the onset of fiber–matrix debonding under transverse tension: A comparison between cohesive zone and finite fracture mechanics models. Eng Fract Mech 115: 96-110.

[5] Zamanian M, Mortezaei M, Salehnia B, Jam JE (2013) Fracture toughness of epoxy polymer modified with nanosilica particles: Particle size effect. Eng Fract Mech 97: 193-206.

[6] Brooker RD, Kinloch AJ, Taylor AC (2010) The morphology and fracture properties of thermoplastic-toughened epoxy polymers. J Adhes 86: 726-741.

[7] Imanaka M, Takeuchi Y, Nakamura Y, Nishimura A, Iida T (2001) Fracture toughness of spherical silica-filled epoxy adhesives. Int J Adhes Adhes 21: 389-396.

[8] Spanoudakis J, Young RJ (1984) Crack propagation in a glass particle-filled epoxy resin: Part 1 Effect of particle volume fraction and size. J Mater Sci 19: 473-486.

[9] Ragosta G, Abbate M, Musto P, Scarinzi G, Mascia L (2005) Epoxy-silica particulate nanocomposites: Chemical interactions, reinforcement and fracture toughness. Polymer 46: 10506-10516.

[10] Zhang H, Zhang Z, Friedrich K, Eger C (2006) Property improvements of in situ epoxy nanocomposites with reduced interparticle distance at high nanosilica content. Acta Mater 54: 1833-1842.

[11] Rosso P, Ye L, Friedrich K, Sprenger S (2006) A toughened epoxy resin by silica nanoparticle reinforcement. J Appl Polym Sci 100: 1849-1855.

[12] Johnsen BB, Kinloch AJ, Mohammed RD, Taylor AC, Sprenger S (2007) Toughening mechanisms of nanoparticle-modified epoxy polymers. Polymer 48: 530-541.

[13] Ma J, Mo MS, Du XS, Rosso P, Friedrich K, Kuan HC (2008) Effect of inorganic nanoparticles on mechanical property, fracture toughness and toughening mechanism of two epoxy systems. Polymer 49: 3510-3523.

[14] Gitman IM (2007) Gradient elasticity with internal length and internal inertia based on the homogenisation of a representative volume element. J Mech Behav Mater 18: 1-6.

[15] Higuchi R, Yokozeki T, Nagashima T, Aoki T (2019) Evaluation of mechanical properties of noncircular carbon fiber reinforced plastics by using XFEM-based computational micromechanics. Compos Part A Appl Sci Manuf 126: 105556.

[16] Hamed Mashhadzadeh A, Fereidoon A, Rostamiyan Y, Khatibi MM, Mohammadi MR, Nikjoo A (2017) Using Taguchi approach for optimizing mechanical properties of hybrid laminates nanocomposite. Proc Inst Mech Eng Part E J Process Mech Eng 231: 773-785.

[17]Goda I, Padayodi E, Raoelison RN (2024) Computational analysis of the interfacial debonding in polymer composites: Research progress and challenges. Adv Compos Hybrid Mater 7: 231.

[18] Legarth BN, Yang Q (2016) Micromechanical analyses of debonding and matrix cracking in dual-phase materials. J Appl Mech 83: 051006.

[19] Naghdinasab M, Farrokhabadi A, Madadi H (2018) A numerical method to evaluate the material properties degradation in composite RVEs due to

[31] Luo X, Baxevanakis KP, Silberschmidt VV (2024) Microstructure-based CZE model for crack initiation and growth in CGI: Effects of graphite-particle morphology and spacing. Solids 5: 123-139.

[32] Permanoon A, Akhaveissy AH (2022) An investigation of meso-scale crack propagation process in concrete beams using topology optimization. Amirkabir J Civil Eng 53: 5281-5306 (In Persian).

[33] Belytschko T, Black T (1999) Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. Int J Numer Methods Eng 45: 601-620.

[34] Melenk JM, Babuška I (1996) The partition of unity finite element method: Basic theory and applications. Comput Methods Appl Mech Eng 139: 289-314.

[35] Barenblatt GI (1959) Equilibrium cracks formed during brittle fracture: Rectilinear cracks in plane plates. J Appl Math Mech 23: 1009-1020.

[36] Dugdale DS (1960) Yielding of steel sheets containing slits. J Mech Phys Solids 8: 100-104.

[37] Kubair DV, Geubelle PH, Huang YY (2003) Analysis of rate-dependent cohesive model for dynamic crack propagation. Eng Fract Mech 70: 685-704.

[38] Davila CG, Camanho PP (2001) Decohesion elements using two and three-parameter mixed-mode criteria. In: American Helicopter Society Conference.

[39] Pappadà S, Salomi A, Montanaro J, Passaro A, Caruso A, Maffezzoli A (2015) Fabrication of a thermoplastic matrix composite stiffened panel by induction welding. Aerosp Sci Technol 43: 314-320.

[04] Halpin J (1969) Stiffness and expansion estimates for oriented short fiber composites. J Compos Mater 3: 732-734.

[41] Mori T, Tanaka K (1973) Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. Acta Metall 21: 571-574.

[42] Eshelby JD (1959) The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. Proc R Soc Lond A 252: 561-569.

[43] Aragh BS, Barati AN, Hedayati H (2012) Eshelby–Mori–Tanaka approach for vibrational behavior of continuously graded carbon nanotube-reinforced cylindrical panels. Compos Part B Eng 43: 1943-1954.

[44] Murshed MR, Ranganathan SI (2017) Hill–Mandel condition and bounds on lower symmetry elastic crystals. Mech Res Commun 81: 7-10.

[45] Herráez M, Mora D, Naya F, Lopes CS, González C, Llorca J (2015) Transverse cracking of cross-ply laminates: A computational micromechanics perspective. Compos Sci Technol 110: 196-204.

fiber-matrix debonding and induced matrix cracking. Finite Elem Anal Des 146: 84-95.

[20] Farrokhabadi A, Madadi H, Naghdinasab M, Rafie A, Taghizadeh SA, Herráez M (2022) Micromechanical investigation of cross-ply carbon composite laminates with glass microtubes using CZM and XFEM. Mech Adv Mater Struct 29: 5624-5636.

[21] Farrokhabadi A, Naghdi Nasab M (2016) Micromechanical study of fibre-matrix debonding and matrix cracking using cohesive zone model and extended finite element method. J Sci Technol Compos 3: 21-30.

[22] Farrokhabadi A, Babaei R (2019) Development of an integrated micro macro model for anticipating matrix cracking evolution and fiber breakage in the laminated composite containing an open hole. Eng Fract Mech 211: 161-179.

[23] Madadi H, Naghdinasab M, Farrokhabadi A (2020) Numerical investigation of matrix cracking propagation in cross-ply laminated composites subjected to three-point bending load using concurrent multiscale model. Fatigue Fract Eng Mater Struct 43: 1159-1169.

[24] Zamanian M, Ashenai Ghasemi F, Mortezaei M (2021) Interphase characterization and modeling of tensile modulus in epoxy/silica nanocomposites. J Appl Polym Sci 138: 49755.

[25] Zamanian M, Ashenai Ghasemi F, Mortezaei M (2021) An efficient nanoscale representative volume element simulation including graded interphase for tensile behavior of epoxy/silica nanocomposites. J Appl Polym Sci 138: 51332.

[26] Ni T, Zaccariotto M, Galvanetto U (2023) A peridynamic approach to simulating fatigue crack propagation in composite materials. Philos Trans R Soc A 381: 20210217.

[27] Zhao C, Ren R, Zhong J, Goh KL, Zhang K, Zhang Z, Le G (2022) Intralaminar crack propagation of glass fiber reinforced composite laminate. Structures 41: 787-803.

[28] Zhao B, Zhao Y, Shen Y, He H, Qu Z (2023) Numerical simulation and comparison of the mechanical behavior of toughened epoxy resin by different nanoparticles. ACS Omega 8: 31123-31134.

[29] Tanimola JO, Efe S (2024) Recent advances in nano-modified concrete: Enhancing durability, strength, and sustainability through nano silica (nS) and nano titanium (nT) incorporation. Appl Eng Sci 19: 100189.

[30] Tan W, Martínez-Pañeda E (2021) Phase field predictions of microscopic fracture and R-curve behaviour of fibre-reinforced composites. Compos Sci Technol 202: 108539.