

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

На правах рукописи

Ташкинов Михаил Анатольевич

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МЕХАНИЧЕСКОГО ОТКЛИКА
И ДИЗАЙНА СТРУКТУРНО-НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД С
УЧЕТОМ МНОГОТОЧЕЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Пермь – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА 1. МЕТОДЫ ГЕНЕРАЦИИ, МОРФОЛОГИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ И СТОХАСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ СЛУЧАЙНЫХ СТРУКТУР	20
1.1 Математическая описание морфологии неоднородных структур.....	21
1.2 Реконструкция геометрии неоднородных сред	30
1.3 Алгоритмы генерации геометрии случайных структур.....	33
1.4 Гомогенизация эффективных механических характеристик неоднородных сред.....	37
1.5 Статистическое описание напряженно-деформированного состояния в неоднородных средах	42
ГЛАВА 2. СТОХАСТИЧЕСКИЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ СТРУКТУРНО- НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД И ИХ РЕШЕНИЕ В МНОГОТОЧЕЧНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ	49
2.1. Стохастическая краевая задачи теории упругости.....	49
2.2. Последовательное разложение решения стохастической краевой задачи.....	52
2.3. Определение значений структурных многоточечных моментных функций.....	57
2.4. Численные методы решения многомерных интегральных уравнений...	63
ГЛАВА 3. ВЗАИМОСВЯЗЬ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК.....	70
3.1. Многоточечное интегральное разложение для статистических моментов полей напряжений и деформаций	71
3.2. Статистическое описание деформирования многокомпонентных композитов	82

3.3. Корреляционные функции полей напряжений и деформаций для компонент неоднородных сред	89
3.4. Расчет упругих эффективных свойств двухфазных сред с использованием многоточечных статистических дескрипторов и метода интегральных уравнений	96
ГЛАВА 4. МНОГОТОЧЕЧНЫЙ СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ЛОКАЛИЗАЦИИ МИКРОМАСШТАБНОГО УПРУГОГО ПОВЕДЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД	
4.1. Распределения случайных полей напряжений и деформаций	108
4.3. Вероятность разрушения неоднородных сред	127
4.4. Способы экспериментальной верификации статистических распределений полей деформаций	130
ГЛАВА 5. ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ СТРУКТУР	
5.1. Взаимосвязь морфологии микроструктуры и распределения напряжений в пористых структурах с замкнутыми порами	146
5.2. Морфология микроструктуры и механические свойства 3D-печатных композитов, армированных короткими волокнами	164
ГЛАВА 6. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОЕКТИРОВАНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД	
6.1. Адаптация механического отклика биомедицинских скаффолдов для регенерации костной ткани	179
6.2. Оценка механического отклика мультиморфологических скаффолдов с градиентном пористости	187
6.3. Исследования изменения распределений напряжений в скаффолдах в процессе биodeградации полимерного материала	191

6.4. Влияние жесткости наполнителя на напряженно-деформированное состояние трехмерной двухкомпонентной ауксетичной решетчатой структуры	196
ГЛАВА 7. РЕКОНСТРУКЦИЯ ГЕОМЕТРИИ НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД С ПРИМЕНЕНИЕМ МОРФОЛОГИЧЕСКИХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК.....	201
7.1. Реконструкция микроструктуры на основе оптимизационных алгоритмов	202
7.2. Реконструкция микроструктуры с помощью нейронных сетей с верификацией морфологических характеристик.....	208
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	217
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	219

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.

Одной из основных задач математического моделирования в области материаловедения является установление связи между физическими и механическими свойствами материалов, их микроструктурными особенностями и параметрами, влияющими на них в процессе производства. На протяжении многих веков сбор большого объема эмпирической информации был единственным способом исследования этой связи. Новые модели и методы численного моделирования, начавшие развиваться в XX веке, значительно расширили возможности производства материалов с заданными параметрами, адаптированными под конкретные инженерные задачи. Это позволило заменить ресурсоёмкие экспериментальные методы математическим моделированием и дало толчок к созданию новых классов материалов.

К числу наиболее перспективных относятся неоднородные материалы, состоящие из нескольких фаз с различными свойствами. Примерами таких материалов являются композиционные материалы с дискретным и волоконным армированием, поликристаллические металлические и керамические сплавы, многокомпонентные аморфные материалы и некоторые классы полимеров [1]. Для успешного исследования механического поведения неоднородных материалов необходимо учитывать сложные взаимодействия внутренних микромасштабных составляющих. Поиск взаимосвязей между распределением, формой и свойствами отдельных компонентов и макроскопическим откликом неоднородных материалов является одним из наиболее активно изучаемых вопросов в области механики.

Как правило, многомасштабное моделирование неоднородных материалов сопряжено с гомогенизацией (передачу информации с нижнего на

верхний масштабный уровень) [2–17], либо локализацией (с верхнего на нижний уровень) [16, 18–23]. Анализ локального механического поведения в этом случае основан на исследовании распределений напряжений и деформационных полей в моделях, которые зависят не только от свойств микромасштабных компонентов, но и от параметров морфологии. Последние достижения в экспериментальном изучении структуры материалов, такие как рентгеновская микротомография [24–27], рентгеновская дифракционная микроскопия [28, 29] и другие [30–33], позволяют получать трехмерные данные о микроструктуре в различных масштабах. В связи с этим большие усилия направлены на разработку новых подходов, сочетающих традиционные модели механики сплошной среды с методами анализа значительных объемов микроструктурной информации с целью повышения точности решения задач локализации и гомогенизации. Особенно актуальной является разработка моделей и аналитических средств для материалов, обладающих случайной микроструктурой со стохастическими свойствами. Передача информации между масштабными уровнями в таких материалах является ключевым аспектом в моделировании механического поведения.

Большинство существующих подходов ориентированы на передачу информации в одном направлении – от микроструктуры к ее эффективным характеристикам, и не способны результативно решать обратные задачи. Аналитические подходы, основанные только на скалярных морфологических характеристиках (таких как, например, объемная доля), не учитывают пространственные микроструктурные особенности и могут привести к неверным прогнозам в случаях, когда решающее значение имеют внутреннее расположение и взаимодействие компонентов. Альтернативой является разработка физико-механических моделей, способных подкрепить получение локальных и макроскопических свойств неоднородных сред достаточным количеством микроструктурной информации.

Существенный вклад в развитие многоуровневых моделей механики неоднородных материалов внесли работы отечественных исследователей: Б.Д. Аннина [34], Н.С. Бахвалова [35], Р.Р. Балохонова [36], В.В. Болотина [37, 38], Г.А. Ванина [39], В.А. Ломакина [40], Е.В. Ломакина и Б.Н. Федулова [41–43], С.А. Лурье [44–50], В.Е. Панина [51], Б.Е. Победри [52], С.Г. Псахье [53–57], В.П. Радченко [58], В.А. Романовой [36, 59], П.В. Трусова [60–64] и др.

Результаты, полученные в различных стохастических постановках, отражены в монографиях и статьях И.М. Лифшица, Л.Н. Розенцвейга [65, 66], Т.Д. Шермергора [67], С.Д. Волкова [68–73], Е. Kröner [74, 75], M.J. Beran [76], S. Torquato [77–79], O. Pierard [15, 23], S. Kalidindi [22, 80, 81], D. Fullwood [82–84], В.А. Буряченко [85–88], E. Ghossein [89], Y. Jiao [90] и др. [8, 75, 91–93]. Значительный вклад в развитие математических моделей структурно-неоднородных сред и механики композитов внес Ю.В. Соколкин и его ученики А.А. Ташкинов, А.А. Паньков, В.Э. Вильдеман и др. [94–105]. Этими авторами был предложен подход, при котором локальные поля и макроскопические свойства случайных сред анализируются на основе решения интегральных уравнений с функциями Грина, а также с учетом морфологических статистических дескрипторов в виде n -точечных пространственных корреляций [79] и других статистических характеристик [106, 107]. Такой подход позволяет формализовать информацию о сложных морфологических параметрах и эффективен для решения многомасштабных задач, требующих учета различных особенностей и вариаций микроструктуры неоднородных материалов. Он подходит для описания неоднородных сред с небольшими отличиями в механических свойствах компонентов [92, 108] и/или низкими объемными долями включений [109, 110]. Ряд работ С. Торкватто был посвящен применению метода возмущений и интегральных уравнений для анализа эффективной проводимости и упругих свойств двухфазных сред [11, 79, 111, 112].

Несмотря на то, что основы использования статистических характеристик для описания стохастических полей напряжений и деформаций в случайных неоднородных средах были исследованы ранее, примеры практического внедрения таких методов, особенно в случае рассмотрения n -точечных корреляций, весьма ограничены. В данной работе представлен общий подход для анализа параметров распределения полей напряжений и деформаций в компонентах неоднородных сред, учитывающих многоточечные взаимодействия между микромасштабными морфологическими составляющими, разработаны способы его численной реализации, а также рассмотрены некоторые частные случаи его применения в задачах проектирования отклика и прогнозирования поведения неоднородных сред.

Целью работы является разработка математических моделей для проектирования, прогнозирования и анализа механического отклика неоднородных сред на основе стохастических подходов механики с учетом многоточечных структурных взаимодействий.

Для достижения обозначенной цели были поставлены следующие **научные задачи**:

1. Обобщение постановок и решений стохастических краевых задачи в многоточечных приближениях на случай многокомпонентных неоднородных сред.
2. Разработка математических моделей для расчета параметров распределений полей напряжений и деформаций в приближениях высокого порядка.
3. Установление аналитической взаимосвязи между многоточечными структурными статистическими дескрипторами и механическим откликом неоднородных сред.

4. Создание алгоритмов и программных инструментов для реализации разработанных математических моделей и подходов.

5. Исследование влияния морфологических микроструктурных параметров на особенности эффективного и локального механического отклика в неоднородных средах на основе разработанных математических моделей.

6. Создание подхода для решения задач рационального проектирования структуры неоднородных сред с использованием методов оптимизации и машинного обучения.

Методология и методы исследования.

Методологической базой для решения задач диссертационной работы являются методы математического моделирования, механики деформируемого твердого тела и механики неоднородных сред. В частности, в работе применялись аппарат математической морфологии, подходы стохастического моделирования, статистического анализа, методы многомерного численного интегрирования, конечно-элементного анализа, трехмерного проектно-ориентированного моделирования, методы многокритериальной оптимизации и машинного обучения.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Разработан комплекс новых математических моделей, определяющих взаимосвязь между морфологией и механическим откликом многокомпонентных неоднородных сред на основе решения стохастической краевой задачи в многоточечном приближении.

2. Разработаны и верифицированы новые вычислительные методы для прогнозирования локального механического отклика неоднородных сред на основе формализованных данных о микроструктуре с учетом многоточечных микроструктурных взаимодействий.

3. Создана новая модель для вычисления эффективных упругих свойств неоднородных сред в многоточечных приближениях.

4. Созданы и апробированы математические модели для дизайна, адаптации и поиска эквивалентных неоднородных сред с учетом морфологических и физико-механических параметров.

5. Разработаны новые алгоритмы и программные инструменты для решения задач механики и дизайна неоднородных сред.

Теоретическая и практическая значимость работы.

Теоретическая значимость работы состоит в создании научных основ для проектирования неоднородных материалов и конструкций. Разработанные модели и методы решения стохастических краевых задач механики композитов могут быть использованы для сравнительного анализа влияния различных морфологических параметров на характеристики полей напряжений с целью создания материалов с заранее заданным комплексом свойств и оценки вероятностей их разрушения. Методы реконструкции, учитывающие многоточечные статистические характеристики, могут быть использованы для создания структур с оптимальными, либо рациональными, свойствами, адаптированными для решения конкретных задач.

Практическая значимость работы заключается в разработке математических моделей, методов и алгоритмов, оформленных в виде зарегистрированных программных продуктов, которые могут быть использованы научно-исследовательскими и проектно-конструкторскими организациями, занимающимися разработкой и проектированием конструкций из неоднородных материалов, а также неоднородных структур для различных областей применения.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Многоточечная аппроксимации решения стохастической краевой задачи и ее обобщение на случай многокомпонентных сред. Способ определения значений моментных функций на основе методов интегрирования по объему.
2. Математическая модель взаимосвязи статистических характеристик полей деформирования и морфологии. Метод расчета корреляционных функций напряжений и деформаций в компонентах неоднородных сред. Стохастическая модель для вычисления эффективных упругих свойств с учетом трехточечных взаимодействий, результаты ее применения для двухфазных моделей неоднородных сред.
3. Метод для восстановления распределений локальных полей напряжений и деформаций в неоднородных средах на основе формализованных данных о микроструктуре в виде многоточечных статистик. Результаты расчета распределений для случая взаимопроникающих неоднородных структур. Верификации модели с использованием метода конечных элементов. Метод верификации упругих констант модели на основе распределенных данных о значениях деформаций.
4. Математические модели для исследования влияния морфологических особенностей случайных неоднородных сред на локальный механический отклик, формализованный в виде статистических распределений, для случая пористых и двухфазных композитов. Результаты применения статистического подхода для решения задач проектирования биомедицинских скаффолдов и структур на основе ауксетичных метаматериалов.
5. Подход для реконструкции, адаптации и поиска эквивалентных неоднородных сред с учетом морфологических и физико-механических параметров. Результаты применения статистического подхода для анализа соответствия исходных и сгенерированных структур.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждается удовлетворительным соответствием результатов численного моделирования

экспериментальным данным, обеспечиваются сходимостью результатов, полученных с помощью разработанных вычислительных алгоритмов и программ, воспроизводимостью полученных результатов. Содержащиеся в работе положения и выводы также подтверждены сопоставлением результатов, полученных на основе различных методик и приближений.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы представлялись автором в устных докладах на Всероссийских и Международных конференциях: Международная конференция «Современная механика: Структура, материалы, трибология» (2024), 3-й Международный семинар по пластичности, повреждению и разрушению инженерных материалов (2023), 2-я Международная конференция по медицинским устройствам: Материалы, механика и производство (2023), Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (2023, 2015 и 2011), Зимняя школа по механике сплошных сред (2023, 2019, 2017, 2015 и 2011), Международная конференция по моделированию материалов (2022, 2019 и 2011), Виртуальная 4-я Международная конференция по структурной целостности (2021), 1-я Виртуальная конференция по структурной целостности (2020), 16-я Международная конференция по гражданским, структурным и экологическим инженерным вычислениям (2019), Тематическая конференция по смарт структурам и материалам ECCOMAS (2019), 16-я Международная конференция по инженерным вычислениям в области гражданского строительства и окружающей среды (2019), 1-я Международная конференция по численному моделированию в инженерных науках (2018), 1-я Международная конференция по теоретической, прикладной, экспериментальной механике (2018), Мировой конгресс по вычислительной механике (2014 и 2012), 20-я Международная конференция по композиционным материалам (2015), Коллоквиум Euromech 577 «Микромеханика металлокерамических композитов» (2015), 14-я Международная конференция по разрушению (2017), 10-я Международная

конференция по науке и технологиям в области композитов (2016), Международная конференция по вычислительной механике материалов, (2013 и 2010), Международная конференция по механике композитов (2017 и 2013), Европейская конференция по композиционным материалам (2014 и 2012), 20-я Европейская конференция по разрушению (2014), Европейский Конгресс по вычислительным методам в прикладных и инженерных науках (2016 и 2012), Первая Международная конференция по механике композитов (2014), Международный семинар «Разрушение неоднородных материалов при интенсивных нагрузках: эксперимент и многоуровневое моделирование» (2014), Международная конференция «Высокопроизводительные параллельные вычисления на кластерных системах» (2014 и 2010), Конференция ASME по прикладной механике и материалам (2011), Первая Международная конференция по достижениям в области взаимодействия и многомасштабной механики (2010).

Диссертационная работа полностью докладывалась и обсуждалась на семинарах кафедры «Динамика и прочность машин» ПНИПУ (рук. д.т.н., академик РАН, проф. В.П. Матвеев), Института механики сплошных сред УрО РАН (рук. д.т.н., академик РАН, проф. В.П. Матвеев), Центра экспериментальной механики ПНИПУ (рук. д.ф.-м.н., проф. В.Э. Вильдеман), кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» ПНИПУ (рук. д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусков).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 106 печатных работ, в том числе 42 статьи в изданиях Web of Science и/или Scopus [113–154], из них 21 [113–133] в журналах первого и второго квартиля. Получено 22 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ [155–176].

Личный вклад автора. Автором получены все включенные в диссертацию результаты: аналитический обзор литературы по тематике работы, постановка задач, обоснование и формулировка основных положений,

определяющих научную новизну и практическую значимость исследования, разработка моделей и алгоритмов их реализации, создание комплексов программ, проведение вычислительных экспериментов, анализ и обобщение аналитических и численных результатов моделирования, формулировка выводов.

Связь исследований с научными проектами. Работы по тематике диссертации проводились при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание на выполнение фундаментальных научных исследований, проекты FSNM-2024-0013, FSNM-2025-0001, FSNM-2023-0003, в рамках гранта, выделяемого для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных организациях высшего образования, научных учреждениях и государственных научных центрах Российской Федерации, соглашение № 075-15-2021-578), в рамках проектов Российского научного фонда (гранты №22-79-10350, №20-79-00216, №18-71-00135, №15-19-00243), Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 20-48-596011, №19-41-590023, №16-41-590259, №16-01-00327), Гранта Президента для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук (МК-2395.2017.1 и МК-5172.2015.1).

Благодарности. Автор выражает глубокую благодарность и признательность коллегам и соавторам из научно-исследовательской лаборатории «Механика биосовместимых материалов и устройств» (в особенности научному руководителю лаборатории проф. В.В. Зильбершмидту), сотрудникам кафедры «Динамика и прочность машин» и ее заведующему акад. РАН, д.т.н., профессору В.П. Матвеевко, сотрудникам Центра экспериментальной механики ПНИПУ и его руководителю д.ф.-м.н., профессору В.Э. Вильдеману, а также всем участникам научного сообщества,

принимавшим участие в обсуждении результатов диссертации на конференциях и семинарах.

Структура и объём работы. Диссертационная работа состоит из введения, семи глав, заключения, списка использованной литературы (421 наименование). Работа изложена на 267 страницах, содержит 68 иллюстраций, 11 таблиц.

Во введении приведено обоснование актуальности выбранной темы исследования и характеристика степени ее разработанности. Сформулированы цель и задачи работы. Освещена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, подходы и методы исследования, положения, выносимые на защиту. Приведена информация о степени достоверности и об апробации результатов. Представлено краткое описание содержания глав диссертационной работы.

Первая глава посвящена анализу современного состояния исследований в области моделирования стохастических неоднородных сред. В п.1.1 рассматриваются методы математического описания морфологии неоднородных структур с использованием инструментов математической морфологии, теории вероятностей и математической статистики. Особое внимание уделяется статистическим характеристикам (моментным и корреляционным функциям), которые позволяют количественно характеризовать микроструктуру и устанавливать связь между её морфологией и эффективными свойствами материала. В п.1.2 описываются подходы к реконструкции геометрии неоднородных сред на основе статистических характеристик, прежде всего моментных функций, что позволяет формировать статистически эквивалентные модели микроструктур. В п.1.3 приводятся алгоритмы генерации геометрии случайных структур, используемые для моделирования представительных объёмов неоднородных материалов. Приводятся основные подходы позволяющие создавать

трехмерные модели различных типов двух- и многофазных неоднородных структур с заданными морфологическими параметрами. В п.1.4 представлены методы гомогенизации упругих механических свойств неоднородных сред на основе статистических характеристик. Рассматриваются подходы позволяющие установить связь между характеристиками микроструктуры, локальными и макроскопическими свойствами материалов. В п.1.5 рассматривается проблема статистического описания напряжённо-деформированного состояния в неоднородных средах. Особое внимание уделяется учёту микромасштабных флуктуаций напряжений и деформаций, существенно влияющих на процессы разрушения и нелинейное поведение материалов.

Во второй главе приводится постановка и решение краевых задач теории упругости для неоднородных сред в многоточечном приближении. В п.2.1 приводится математическая постановка и разрешающие соотношения стохастической краевой задачи теории упругости для представительного объема неоднородных сред. В п.2.2 представлен способ последовательного разложения решения стохастической краевой задачи с использованием метода функций Грина. В п.2.3 приводится алгоритм определения значений структурных многоточечных моментных функций, используемых в решении стохастической краевой задачи в качестве характеристик морфологии неоднородной среды. В п.2.4 описываются численные методы решения многомерных интегральных уравнений, содержащих функцию Грина.

Третья глава посвящена установлению аналитической связи между морфологическими характеристиками структуры и статистическими параметрами распределений напряжений и деформаций в представительном объеме неоднородных сред, а также эффективными характеристиками представительного объема. В п.3.1 выводятся аналитические выражения для центральных моментов напряжений и деформаций с учетом многоточечного

приближения решения стохастической краевой задачи. В п 3.2 на примере многокомпонентных сред показан расчет моментов первого и второго порядка полей напряжений и деформаций в трехточечном приближении. В п.3.3 показан вывод выражений для многоточечных условных и безусловных моментных функций полей напряжений и деформаций в представительных объемах композитов. В п. 3.4 рассмотрен пример расчета упругих механических эффективных свойств двухфазных сред с использованием многоточечных статистических дескрипторов и метода интегральных уравнений.

Четвертая глава посвящена решению задач исследования локализации механического поведения в представительных объемах неоднородных сред с помощью определения параметров модельных статистических распределений. В п.4.1 приведен общий подход для определения распределений случайных полей напряжений и деформаций в компонентах неоднородных сред с использованием центральных статистических моментов. В п. 4.2 на примере взаимопроникающих случайных сред, которые не попадают в область применимости известных моделей для дискретных включений, была рассмотрена задача верификации распределений, полученные на основе стохастического подхода, с использованием метода конечных элементов. В п.4.3 описывается применение методов и инструментов статистического анализа для расчета вероятности разрушения неоднородных сред. В п.4.4 приводятся некоторые способы экспериментальной верификации статистических распределений полей деформаций, а также алгоритм оптимизации, который можно использовать для уточнения значений упругих констант моделей.

В пятой главе приводятся некоторые результаты исследования зависимости механических свойств различных неоднородных сред от вариации их внутренних морфологических параметров. В п.5.1 представлены

результаты исследования взаимосвязи морфологии микроструктуры и механического поведения пористых материалов с замкнутыми пораами с вакуумом внутри. В п.5.2 приводятся результаты исследования взаимосвязи морфологии микроструктуры и механических свойств полимерных композитов для аддитивного производства, армированных короткими волокнами.

В главе 6 приведены примеры использования инструментов стохастической механики для решения практических задач проектирования и прогнозирования поведения структур. В п.6.1 представлена задача адаптация механического отклика пористых биомедицинских скаффолдов для регенерации костной ткани. В п.6.2 рассматривается задача оценки механического отклика мультиморфологических скаффолдов с градиентном пористости на основе статистических распределений с учетом предела упругости. В п.6.3 инструменты статистического анализа поля напряжений применены для изучения процесса биodeградации полимерных скаффолдов. В п.6.4 с использованием инструментов анализа распределений напряжений представлены результаты исследования влияние жесткости наполнителя на напряженно-деформированное состояние трехмерного метаматериала – ауксетичной решетчатой структуры.

В главе 7 представлена методология для реконструкции геометрии неоднородных сред с применением морфологических статистических характеристик. Процесс реконструкции предполагает восстановление геометрии микроструктуры, морфология которой соответствует неким заданным свойствам. В п.7.1 представлен подход для реконструкции статистически эквивалентной микроструктуры неоднородных сред на основе задачи оптимизации, которая решается с помощью корректировки некоторой произвольной начальной структуры с целью минимизации функции, которая измеряет разницу между выбранными статистическими характеристиками

эталонной и реконструируемой среды. В п.7.2 приведен пример использования структурных статистических характеристик для реконструкции трехмерной микроструктуры неоднородных материалов по данным двумерных изображений (срезов) с использованием генеративных нейронных сетей.

ГЛАВА 1. Методы генерации, морфологического описания и стохастической механики случайных структур

Задачи моделирования неоднородных сред исторически основаны на механике жидкостей и тесно связаны с задачей статистического описания поведения систем отдельных частиц [177, 178]. Микроструктурные особенности неоднородных сред на различных масштабах обычно изучаются в рамках концепции представительного объёма. Этот объем определяется как конечная область образца материала, которая содержит достаточное для статистического описания состояния тела число «носителей» рассматриваемых механизмов процесса. В рамках этой концепции локальные свойства и поля на более низком масштабном уровне описываются с помощью традиционных уравнений сплошной среды, хотя в пределах представительного объема они имеют осциллирующий характер, который определяется тем, что компоненты способны сохранять свою форму и относительное положение во время деформации материала. Существуют два основных общепринятых предположения о статистических свойствах случайных сред. Во-первых, гипотеза о статистической однородности предполагает, что для любого объема, взятого из материала, статистические свойства измеряемой случайной величины будут одинаковы. Во-вторых, гипотеза эргодичности предполагает, что ансамблевое усреднение случайных величин по совокупности объемов одного и того же материала равнозначно усреднению тех же величин по одному представительному объему. Эти предположения позволяют разработать многомасштабные механические модели представительных объемов случайных сред с использованием методов математической морфологии и определений стохастического анализа.

1.1 Математическая описание морфологии неоднородных структур

Морфология представительного объема играет важную роль в моделировании эффективных термомеханических и физических свойств случайных неоднородных материалов [11, 78, 179–181]. Внутреннее строение неоднородных сред можно представить в виде сложной стохастической системы, состоящей из множества взаимодействующих компонентов, для описания которых могут быть введены инструменты теории вероятностей и математической статистики [182–184]. Такой подход образует группу математических методов, определяемую как математическая морфология. В качестве формальных морфологических характеристик представительных объемов неоднородной среды могут использоваться моментные функции и физические дескрипторы (например, объемная доля и средний размер частиц или зерен).

Математическая морфология изначально использовалась для формализации микроскопических изображений путём извлечения количественной информации [182, 185, 186]. В основном она базируется на инструментарии теории множеств, топологии и случайных функциях. Возможности математической морфологии значительно расширились с момента её появления: от обработки двумерных бинарных чёрно-белых изображений до трёхмерных геометрических структур. Инструменты математической морфологии широко применяются в материаловедении для характеристики сложных внутренних структур неоднородных материалов, например, для анализа данных, полученных с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), трансмиссионной электронной микроскопии (ТЭМ), рентгеновской томографии. Согласно базовой методологии, изображения и структуры подвергаются дискретизации и преобразованиям перед количественной оценкой. Например, данные о микроструктуре могут быть преобразованы пороговой обработкой в бинарный

массив, который математически описывается как случайное множество [187]. Впоследствии могут применяться автоматические процедуры для определения необходимых измерений и различных статистических оценок.

Вычисление средних значений (или статистик первого порядка) традиционно использовалось для характеристики и количественной оценки микроструктуры [1]. Простейшей характеристикой является объёмная доля каждой фазы, которую можно вычислить как отношение площади или объёма, занимаемого одним из бинарных значений. Другим примером может служить функция распределения ориентаций для поликристаллических микроструктур. Более сложные дескрипторы происходят из теории случайных полей и вводятся с помощью функций, применяемых к случайным множествам данных. Среди наиболее часто используемых статистических дескрипторных функций: n -точечные функции вероятности, моментные функции поверхностей, функции размера пор, кластерные функции, функции ближайших соседей, функции линейного пути и другие [78, 182]. Ниже представлено описание и практика использования основных многоточечных статистических инструментов математической морфологии.

Одним из наиболее широко используемых статистических инструментов являются моментные функции. Эти функции показывают корреляцию между случайными величинами, такими как, например, пространственные положения неоднородностей в матрице. Это одни из простейших статистических мер, содержащих пространственную информацию, и при этом гораздо более информативные, чем одноточечные статистики [1]. Сами моментные функции могут быть построены для любого случайного поля, присущего неоднородным средам. В общем случае с помощью случайного поля индикаторных функций n -точечная пространственная моментная функция определена как:

$$S_{\lambda_{\alpha}}^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \langle \lambda_{\alpha}(\vec{r}_1) \lambda_{\alpha}(\vec{r}_2) \dots \lambda_{\alpha}(\vec{r}_n) \rangle, \quad (1.1)$$

где $\lambda_{\alpha}(\vec{r})$ индикаторная функция, равная 1, если положение радиус-вектора $\vec{r}$ указывает на фазу α , и 0 в противном случае; $\langle \lambda_{\alpha}(\vec{r}) \rangle$ усредненное значение функции по представительному объему, равное объёмной доле фазы α .

Другое определение функций корреляции предложено в [78], где n -точечная моментные функции вводятся как:

$$P_S^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = p_S, \quad (1.2)$$

где p_S вероятность того, что n точек, заданных радиус-векторами, находятся в локальном состоянии S . Эти функции использовались многими авторами при определении эффективных свойств, таких как электропроводность, модули упругости, проницаемость.

Существует несколько методов получения значений моментных функций для плоских изображений или оцифрованных трёхмерных моделей. Традиционный способ — анализ изображения с помощью набора случайно размещённых векторов и вычисление локального состояния в точках [188]. Специфические алгоритмы обработки изображений применялись в работе [189]. Cule и Torquato, а также Fullwood [83, 190] использовали методы быстрого преобразования Фурье. Для представления моментных функций также были предложены методы быстрой сферической гармонической экспансии [191]. Подробное описание процедур и алгоритмов получения значений и применения моментных функций можно найти, например, в работах Torquato [78] и Fullwood [1].

Применение корреляционных функций (моментных функций второго порядка) в инженерном анализе берет своё начало в исследованиях, связанных с рентгеновским рассеянием и дифракцией. Ещё в работе Debye и соавторов [192] было показано, что корреляционные функции могут использоваться для описания данных рентгеновского рассеяния в пористых материалах со

случайным распределением микроструктурных свойств. Дальнейшее развитие этого направления связано с методологией, предложенной в работе Corson [193], которая установила взаимосвязь между свойствами двухфазных структур и экспериментально вычисляемыми двух- и трёхточечными вероятностными функциями. Существенный вклад в развитие метода внесла техника малоуглового рентгеновского рассеяния, позволяющая получать информацию о распределении включений и дисперсии частиц [194]. Применение корреляционных функций в задачах анализа эффективных свойств или микроструктурных полей напряжений и деформаций продемонстрировало их чувствительность к параметрам морфологии микроструктуры [1, 195].

В последующие годы внимание исследователей привлекли многоточечные моментные функции более высокого порядка, которые обеспечивают более детальное описание микроструктуры. Сложности, связанные с их вычислением, стимулировали развитие методов аппроксимации, основанных на использовании функций более низкого порядка для выражения функций высокого порядка. Это было реализовано, в частности, в работе Remond и соавторов [9].

Техника, основанная на n -точечных моментных функциях, применяется не только к материалам со случайным армированием. Так, концепция n -точечной ориентационной моментной функции, разработанная для поликристаллов, представлена в работе [196]. Обобщение данного подхода для многофазных материалов и поликристаллов подробно рассмотрено в исследовании [197]. Применение корреляционных функций для анализа пространственной кластеризации 3D-микроструктур, восстановленных по вертикальным металлографическим сечениям, было продемонстрировано в работе [198]. В исследовании [199] были использованы результаты так называемого метода исчерпывающего ветвления — альтернативного подхода

к реконструкции дискретных микроструктур по корреляционным функциям, применительно к поликристаллическим системам. Другим направлением является использование гауссовских случайных полей, предложенное в работах [200, 201]. Принципы генетических алгоритмов для реконструкции структур по корреляционным функциям были реализованы в исследованиях [202, 203]. В работе [204] представлены новые алгоритмы, основанные на методах восстановления фазы, применяемых в обработке сигналов. Ряд прикладных исследований с использованием корреляционных функций представлен также в публикациях [205–207]. Особый интерес представляет работа [208], где на основе сходимости независимых корреляционных функций был исследован размер минимального представительного объёма.

Поверхностные корреляционные функции содержат информацию о пространственном распределении межфазных границ в материале и базируются на индикаторной функции поверхности $\chi_\alpha(\vec{r}_1)$, которая принимает ненулевые значения только на границе фазы α неоднородной среды [1, 78]. На её основе формируются различные виды комбинированных двухточечных корреляционных функций:

1. Поверхностно-поверхностная корреляционная функция

$$F_{ss}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \chi_\alpha(\vec{r}_1) \chi_\alpha(\vec{r}_2) \rangle, \quad (1.3)$$

которая характеризует вероятность того, что обе точки $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ будут находиться на межфазной границе. Данная функция позволяет количественно описывать протяжённость и характер корреляции поверхности внутри материала.

2. Поверхностно-фазовая корреляционная функция

$$F_{sp}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \chi_\alpha(\vec{r}_1) \lambda_\beta(\vec{r}_2), \quad (1.4)$$

где $\lambda_\beta(\vec{r}_2)$ индикаторная функция фазы β . Функция описывает вероятность нахождения точки $\vec{r}_1$ на поверхности фазы α , а точки $\vec{r}_2$ внутри фазы β . Она даёт информацию о взаимосвязи интерфейсов и объёмных фаз.

3. Поверхностно-пустотная корреляционная функция

Аналогично предыдущему случаю, эта функция используется для характеристики вероятности нахождения точки на поверхности фазы и точки в частном случае порового пространстве (или в любой другой фазе, трактуемой как «пустота», например, в дефектах). Она особенно актуальна при исследовании пористых материалов и композитов с высокой межфазной поверхностью.

Некоторые дополнительные дескрипторы были предложены в связи с необходимостью учитывать особенности конкретных типов неоднородных материалов. Так, для характеристики пористых сред была введена функция распределения размеров пор $P(\delta)d\delta$. Она определяет вероятность того, что случайно выбранная точка в пределах представительного объёма находится на расстоянии в интервале $[\delta, \delta + d\delta]$ от ближайшей точки, принадлежащей межфазной границе между порой и твёрдой фазой.

В случаях, когда микроструктура неоднородных материалов не является статистически однородной, частицы в пределах представительного объёма могут образовывать группы и кластеры. Для описания этого эффекта используется кластерная функция $C^{(\alpha)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, которая определяет вероятность того, что две точки $\vec{r}_1$ и $\vec{r}_2$ принадлежат одному и тому же кластеру фазы α . Данная функция была подробно описана и применена в исследованиях [78, 209, 210].

Распространено использование характеристик, которые содержат информацию о форме частиц, не зависящую от их пространственного распределения. Функция линейного пути $L^{(\alpha)}(z)$ определяет вероятность того,

что случайно выбранный отрезок заданной длины полностью окажется внутри рассматриваемой фазы α . Другой важной характеристикой является функция распределения длин хорд $P(l)dl$, которая задаёт вероятность того, что случайно проведённая прямая, проходящая через материал, образует хорду внутри данной фазы длиной в интервале $[l, l + dl]$. Эта функция отражает статистическое распределение характерных размеров фазовых доменов и позволяет связать геометрию внутренней структуры материала с его эффективными физико-механическими свойствами. Применение данных функций охватывает широкий спектр разнообразных задач, включая транспортные процессы, оценку проницаемости для жидкостей (в том числе в пористых средах), а также стереологический анализ [211].

Группа функций ближайшего соседа применяется для анализа материалов, армированных отдельными частицами, и описывает вероятность нахождения ближайшего соседа на некотором заданном расстоянии от выбранной частицы. Существует несколько вариаций этих функций, различающихся способом определения выборочного расстояния и опорных точек. В частности, расстояние может измеряться между центрами частиц, между их границами, между произвольной точкой в пределах представительного объема и центром частицы. Кроме того, могут вводиться обратные функции, например, для оценки областей матрицы, свободных от частиц. Функция линейного пути и функция ближайшего соседа использовались совместно для статистической реконструкции среды [188, 212–214].

Сводка основных морфологических дескрипторов представлена в Таблице 1. Порядок функции определяет, является ли она базовой для описания микроструктурного свойства или производной от базового дескриптора. Например, индикаторная функция является относится к функциям низшего порядка. В то же время корреляционные функции

являются функциями более высокого порядка, так как они строятся на основе индикаторных функций. В таблице также приведена информация о типе материала, для представительного объема которого может применяться данная функция, а также о размерности выборки, необходимой для экспериментального получения её значений (трёхмерные данные или плоское двумерное изображение).

Таблица 1.1 – Основные морфологические дескрипторы и их свойства

Функция	Порядок	Характеристика	Тип материала	Размерность выборки
Индикаторная функция	Низший	Наличие фазы	Любые случайные среды	2D и 3D
Моментные функции	Высший	Пространственная корреляция	Любые случайные среды	2D и 3D
Поверхностные корреляционные функции	Высший	Распределение интерфейсов	Любые случайные среды	2D и 3D
Функция распределения размеров пор	Низший	Уровень пористости	Пористые среды	Только 3D
Кластерная функция	Высший	Кластеризация частиц	Любые случайные среды	Только 3D
Линейная функция пути	Низший	Связность микроструктуры	Любые случайные среды	2D и 3D
Функция распределения длин хорд	Низший	Связность микроструктуры и форма частиц	Любые случайные среды	2D и 3D
Функции ближайшего соседа	Низший	Распределение частиц	Среды, армированные частицами	2D и 3D
Функция распределения ориентаций	Низший	Ориентация зёрен, макроскопическая текстура	Поликристаллы	Только 3D
Функция распределения разориентаций	Низший	Локальное расположение зёрен	Поликристаллы	Только 3D
Функция микротекстуры	Низший	Кластеризация ориентаций и разориентаций	Поликристаллы	Только 3D

Математические свойства дескрипторов, введённых для микроструктуры неоднородных сред и материалов, подробно изучены в [1, 78, 184, 215]. Применение инструментов математической морфологии для описания неоднородных сред позволяет установить количественную связь между микроструктурой и свойствами материала, а также оценить влияние таких ключевых факторов, как кластеризация, перколяция, дисперсия и ориентация, на эффективные механические характеристики с использованием чувствительных к этим особенностям дескрипторов. Такой подход теоретически обосновывает концепцию проектирования материалов с заданными свойствами за счёт управления микроструктурой в процессе их изготовления и последующей обработки. Для материалов с преимущественно периодической микроструктурой, таких как, например, текстильные композиты с тканой и плетёной структурой, некоторые из вышеописанных статистических инструментов могут быть использованы для оценки отклонений от периодических закономерностей [216]. Кроме того, они позволяют понять, каким образом случайность в микроструктуре влияет на свойства композитов.

Таким образом, различные статистические дескрипторы отражают специфические характеристики морфологии неоднородных структур. Сравнивая дескрипторы, полученные для разных сред между собой, можно сделать выводы на сколько эти среды отличаются с точки зрения морфологии. Впоследствии эти закономерности можно использовать при построении моделей механического поведения на микроуровне, где морфология среды учитывается в явном виде, а также для методов оценки эффективных свойств. Корреляционные и моментные функции количественно описывают взаимосвязь микроструктурных компонент и могут играть роль мер влияния геометрических эффектов, таких как, например, форма. Так или иначе, все статистические дескрипторы являются мерами оценки тех или иных структурных взаимодействий в точках, расположенных на расстоянии друг от

друга. Для получения их значений необходимо иметь возможность определить интересующие базовые свойства структуры в произвольных геометрических точках. Для морфологических статистических дескрипторов таким свойством является присутствие той или иной фазы в точке.

1.2 Реконструкция геометрии неоднородных сред

Полное статистическое описание микроструктуры неоднородных сред часто бывает вычислительно сложным, если не невозможным, и на самом деле не является необходимым. С морфологической точки зрения, основные вопросы, возникающие в процессе моделирования неоднородных сред, заключаются в том как эффективно и точно описать стохастическую природу среды, и как использовать данные морфологии для создания геометрических моделей микроструктуры, которые являются статистически эквивалентными, сохраняя как можно больше морфологических свойств реальной структуры [217]. Такой подход позволяет выйти за рамки имеющихся эмпирических данных и найти особенные, искусственно созданные реализации микроструктуры, которые приводят к определенным физико-механическим свойствам.

Важное практическое применение статистических дескрипторов — математическая реконструкция представительных объемов на основе данных эталонного образца, формализованных в виде статистических дескрипторов. Такая процедура позволяет избежать повторного использования методов экспериментальной визуализации каждый раз, когда требуется новая модель микроструктуры. Предполагается, что созданная таким образом микроструктура является статистически эквивалентной и обладает всеми соответствующими микроструктурным особенностям.

Корреляционные функции, полученные из экспериментальных данных, позволяют создавать геометрические модели микроструктуры, статистически соответствующие реальным эталонным образцам. Цель алгоритмов реконструкции — минимизировать функционал:

$$E = \sum_{\vec{r}} [\hat{S}_2^\alpha(\vec{r}) - S_2^\alpha(\vec{r})], \quad (1.5)$$

где $S_2^\alpha(\vec{r})$ целевая корреляционная функция, $\hat{S}_2^\alpha(\vec{r})$ корреляционная функция реконструируемой микроструктуры.

Некоторые методы позволяют восстанавливать трёхмерную структуру на основе информации, извлечённой из двумерных сечений [210], что полезно, когда трёхмерная визуализация недоступна.

С. Торкватто исследовал проблему реконструкции одномерных и двумерных микроструктур с использованием стохастической оптимизации, основанной на функциях корреляции низкого порядка [78, 188]. В частности, для минимизации ошибки между функциями корреляции модели и образца применяются методы отжига и Монте-Карло. Для снижения высокой вычислительной нагрузки используется дискретное быстрое преобразование Фурье [83]. Другой метод реконструкции основан на коррелированном случайном гауссовом поле и присваивает области свойство фазового материала, если значение гауссовской случайной переменной находится в заданном диапазоне. Этот подход был математически развит в последующих работах. Его ограничения связаны с некорректностью при обработке сред с более чем двумя фазами и требованием гауссовского характера поля [218].

С. Yeoung и S. Torquato предложили алгоритмическую процедуру, которая использует набор корреляционных функций, полученных из двумерного изображения неоднородной среды, для её трёхмерной реконструкции [219]. Искусственный анизотропный эффект, возникающий в

этом случае, и способы его учёта были обсуждены в работе [220]. Реконструкция случайных сред с использованием функций корреляции низкого порядка была впоследствии усовершенствована Y. Jiao и S. Torquato [221, 222], где была описана процедура выборки цифровых эталонных данных с помощью точек решётки, а также модификация алгоритма оптимизации. Такой подход также был реализован и исследован в работах [218, 223, 224]. Необходимые условия для используемых двухточечных корреляционных функций были выведены в [225].

Дальнейшее развитие описанного метода в части процедуры Монте-Карло представлено в работах M. Baniassidi и соавторов [226, 227] применительно к реконструкции волнистости, геометрии и распределения углеродных нанотрубок. Эти авторы также изучали материалы твердооксидных топливных элементов, для которых трёхмерная реконструкция выполнялась с использованием плоских сечений многокомпонентных композитов [228]. Двумерная реализация микроструктуры, полученная из СЭМ-изображений наполнителей из частиц сажи, диспергированных в резине, была изучена в [229]. Работа [230] была посвящена трёхмерной реконструкции усиленного нанотрубками полипропиленового композита на основе изображений, полученных с помощью сфокусированного ионного пучка и СЭМ.

В целом, ряд авторов отмечает ограничения, присущие моментным функциям низкого порядка в задачах реконструкции. В частности, их использование может приводить к недопустимым ошибкам при оценке различий между исходной и реконструированной средой. Кроме того, было показано, что применение двумерных сечений в качестве основы для трёхмерной реконструкции накладывает ограничения на возможность корректного учёта морфологических особенностей, характерных именно для 3D-структур. Эти обстоятельства обусловили необходимость введения

дополнительных функций, способных учитывать специфику внутренней геометрии и обеспечивать более детализированный и корректный анализ. Техника трёхмерной реконструкции с использованием моментных функций третьего порядка была представлена в [231]. Было показано, что двуточечные моментные функции могут обеспечить лишь приблизительную реконструкцию, тогда как для получения лучших результатов необходимы другие группы статистических дескрипторов.

1.3 Алгоритмы генерации геометрии случайных структур

Типы микроструктуры неоднородных материалов можно разделить на два основных класса. Первый из них можно определить как статистическую смесь, представленную сложными взаимопроникающими каркасами составляющих, каждая из которых обладает собственной несущей способностью. Вторая группа состоит из материалов, сформированных матрицей, армированной включениями сферической, пластинчатой, волокнистой, эллиптической и других форм. Некоторые многокомпонентные композиты также могут иметь смешанные типы структуры. Параметры, влияющие на геометрию представительного объема, включают форму и размер включений, объемную долю и морфологические детали, такие как пространственная ориентация и пространственное распределение включений [232]. Для того чтобы быть статистически представительными, представительный объем должны содержать достаточную информацию об этих характеристиках.

Сегодня современные методы моделирования позволяют создавать геометрические модели представительных объемов с широким диапазоном форм фаз и общей сложностью, однако моделирование случайных микроструктур началось с моделирования случайного расположения сфер. Такие микроструктуры изначально использовались в моделях простых

жидкостей, концентрированных суспензий, аморфных и порошковых материалов. Далее кратко описано развитие подходов математической генерации геометрических моделей случайных структур.

Достижения в моделировании плотных неупорядоченных структур в основном связаны с двумя группами подходов: случайной последовательной адсорбцией и динамическими (или параллельными) методами построения. Последовательные подходы предполагают детерминированную или случайную генерацию микроструктурных частиц. Первое включение размещается с центром в выбранной точке внутри представительного объема. Следующее включение и его центр выбираются случайным образом из уменьшенного объема. Аналогично процесс последовательного и случайного размещения включений продолжается до достижения желаемой объемной доли или до достижения предела уплотнения. Этот метод создает элементарные ячейки с невзаимопроникающими включениями, при этом зазор между включениями определяется пользователем, обычно порядка размера включения [232]. Последовательное размещение было изучено Bennet [233], который описал последовательный метод, когда каждое новое включение размещается в точке, ближайшей к первому, чтобы оно соприкасалось с существующими включениями. Пересечение контролируется путем проверки расстояния между центрами. Позже этот метод был модифицирован введением параметра, характеризующего заполнение области, ограниченной тетраэдром [234]. Алгоритм, позволяющий контролировать кластеризацию включений, был предложен в [235]. Вариант, при котором граничная точка каждого нового включения совпадает с произвольной точкой на поверхности существующих включений, расположенных на дне виртуального бокса, используется в [236–239].

Частицы в неоднородных материалах, как правило, имеют разную форму и размер. Алгоритм последовательной адсорбции использовался для

создания геометрии представительных объемов с дисками [240], сферами и сфероидами [241–243], цилиндрами и сфероцилиндрами [244–248], толстыми волокнами и эллипсоидами [249–252]. Такой алгоритм обычно ограничен с точки зрения достижимой объемной доле [247, 249, 253, 254]. Методы, направленные на увеличение этого предела до 35% были предложены в [255]. Иерархическая случайная последовательная адсорбция, представленная в [232], позволила достичь объемной доли в 45%. Цилиндрические включения можно упаковать с долей 50% с использованием подхода, описанного в [256], а для сферических включений такую же объемную долю можно получить с более плотным алгоритмом упаковки, предложенным в [241].

Особый класс случайных неоднородных материалов составляют ячеистые материалы с порами, такие как пены, дерево, кости и др., и, следовательно, с низкой объемной долей матрицы. В этом случае поры могут быть топологически связанными или несвязанными. Геометрически самыми простыми топологически связанными ячеистыми материалами являются регулярные соты, поведение которых в плоскости можно моделировать с использованием моделей плоских шестиугольных ячеек. Однако несвязанные поры требуют сложного трехмерного геометрического моделирования: включения принимают форму кубов [257] и многогранников [258–263]. Разбиения Вороного стали распространенным инструментом моделирования нерегулярных пен, а недавно для генерации периодических многоклеточных моделей были предложены случайные Лагерровы тесселяции [264, 265].

Включения сложных форм являются важной частью оцифрованного геометрического представления поликристаллических материалов. Например, в модели монодисперсного размера зерна микроструктурные зерна заменяются многогранными включениями. Разбиение Вороного широко используются для геометрических моделей поликристаллов, где они используются для разбиения подрегионов, соответствующих отдельным

зернам [266]. Зерна строятся вокруг центров, которые распределены случайным образом в пространстве. В работе [267] Gross и Li объединили методы Монте-Карло и разбиения Вороного для роста зерен с целью генерации нанокристаллических структур с заданным распределением размеров зерен.

Описанные выше методы относятся к классу статических методов и предполагают, что положения включений фиксированы после синтеза. Динамические модели позволяют реорганизацию структуры в зависимости от способа взаимодействия включений друг с другом [268]. Различные модификации этого метода можно найти, например, в [269–272]. Так, динамический метод генерации плотных структур с невзаимопроникающими включениями предложен в [233]. При этом каждое последовательно размещаемое включение «движется» в направлении других по прямой, соединяющей их центры, пока не будет достигнуто условие контакта. В более сложных моделях система дифференциальных уравнений решается для определения движений и обнаружения пересечений [270].

Существует также метод достижения желаемой плотности включений путем изменения радиусов сфер. В некоторых моделях каждое включение подвергается небольшим случайным перемещениям, независимо от положения соседних включений, пока не будет найдено наилучшее положение для более плотной упаковки включений [273, 274]. Модель твердого ядра, также называемая моделью случайной последовательной адсорбции, обсуждалась в [240, 275].

Модели неоднородных структур могут быть также получены методами Монте-Карло. Некоторые модели случайных структур основаны на периодических решетках. Две из них описаны в [75]: согласно первой, центры включений совмещаются со случайно выбранными узлами решетки, при этом

каждой ячейке присваивается определенная фаза, формируя то, что широко известно как воксельная модель.

Другой тип алгоритмов синтеза с предполагаемым движением частиц основан на молекулярной динамике [276, 277]. Каждому включению присваивается случайный вектор скорости, после чего они приводятся в движение. Одновременно их объемы постепенно увеличиваются. Когда происходит столкновение, скорости двух вовлеченных частиц обновляются в соответствии с принципом сохранения кинетической энергии. Для соблюдения условий периодичности, если частица покидает ячейку через грань во время движения, она появляется с противоположной стороны. Этот подход позволяет создавать наиболее плотно упакованные структуры [278]. Аналогичный метод использовался и для несферических частиц [279], а также при анализе нанокристаллических материалов в [280].

1.4 Гомогенизация эффективных механических характеристик неоднородных сред

Помимо решения задач морфологического анализа, статистические дескрипторы могут использоваться как инструмент для установления взаимосвязи между микроструктурой, локальными и эффективными свойствами неоднородных сред. Поиск подходящей зависимости между распределением, формой и свойствами каждой составляющей и макроскопическим откликом неоднородного материала является одной из наиболее изучаемых проблем микромеханики. Среди множества методов гомогенизации существует широкий класс подходов, основанных на статистическом анализе.

Согласно флуктуационному подходу, значение некоторого случайного поля f в точке $\vec{r}$ внутри представительного объема может быть разложено на сумму среднего значения и флуктуации:

$$f(\vec{r}) = \langle f(\vec{r}) \rangle + f'(\vec{r}), \quad (1.6)$$

где в скобках указан оператор усреднения $\langle \cdot \rangle$, который согласно гипотезе эргодичности равен усреднению по объему:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V} \int_V f(\vec{r}) dV. \quad (1.7)$$

Флуктуационная добавка $f'(\vec{r})$ в уравнении (1.6) показывает, насколько значение поля в этой точке отличается от среднего значения, определенного в уравнении (1.7). Через разложение на усреднённое значение и флуктуационную добавку можно представить локальные поля напряжений и деформаций, а также локальный тензор жёсткости:

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \langle \sigma_{ij}(\vec{r}) \rangle + \sigma'_{ij}(\vec{r}), \quad (1.8)$$

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \langle \varepsilon_{ij}(\vec{r}) \rangle + \varepsilon'_{ij}(\vec{r}), \quad (1.9)$$

$$C_{ijkl}(\vec{r}) = \langle C_{ijkl}(\vec{r}) \rangle + C'_{ijkl}(\vec{r}), \quad (1.10)$$

где $\langle \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle = \langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \rangle = \langle C'_{ijkl}(\vec{r}) \rangle = 0$, $\vec{r}$ это радиус-вектор с компонентами (x_1, x_2, x_3) . Процедура усреднения для произвольной координатно-зависимой величины $f(\vec{r})$ определяется следующим образом:

$$\langle f(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{V} \int_V f(\vec{r}) dV, \quad (1.11)$$

где интегрирование осуществляется по объему V .

Статистические характеристики могут использоваться в уравнениях схем усреднения [281, 282], которые объединяют разложение метода

флуктуаций и соотношение гомогенизации среднего поля посредством тензора локализации $\mathbf{a}(\vec{r})$ [1]:

$$\varepsilon'(\vec{r}) = \mathbf{a}(\vec{r})\varepsilon^*. \quad (1.12)$$

Решения, основанные на функциях Грина и используемые в этих методах, включают корреляционные функции различных порядков. Таким образом, тензор локализации $\mathbf{a}(\vec{r})$ может быть определён через функцию Грина следующим образом:

$$\begin{aligned} a_{ijkl}^{(\chi)}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int_{V_1} \left(G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{jm,i}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \left[C'_{mnkl}(\vec{r}_1) + \right. \\ \left. C'_{mnpq}(\vec{r}_1) a_{pqkl}^{(\chi-1)}(\vec{r}_1) \right]_n dV_1, \end{aligned} \quad (1.13)$$

где $G_{im}(\vec{r}, \vec{r}_1)$ функция Грина, $C'_{mnpq}(\vec{r}_1)$ флуктуация тензора жёсткости (1.10) выражается через структурные моментные функции для представительного объёма, χ обозначает порядок разложения ряда.

Вид функции Грина определяется свойствами среды, тогда как порядок разложения χ задаёт порядок необходимых статистических дескрипторов. Функция Грина в (1.13) имеет сингулярность в точке $\vec{r} = \vec{r}_1$ (подробнее это обсуждается в главе 2). Подходы, позволяющие её преодолеть, а также некоторые связанные с этим аппроксимации приведены в работах [75, 78, 112, 283]. Результаты применения первых и вторых производных функции Грина для решения проблемы сингулярности обсуждаются в [137].

Известно, что точного прогноза значения эффективных свойств случайных сред достичь невозможно, но строгая оценка может быть выполнена в виде границ. Одни из наиболее часто используемых границ основаны на вариационном принципе, согласно которому эффективный параметр выражается через функционал, для которого формулируется вариационный (экстремальный) принцип. В первую очередь, вариационные

методы для целей гомогенизации анализируют приближённые поля, подставляемые в энергетические границы путём усреднения плотности энергии [284], тогда как классические вариационные методы используют принципы минимальной энергии для получения границ эффективных свойств. Микроструктурная информация учитывается через различные типы моментных функций [79, 285–287]. Корреляции, необходимые для расчёта границ эффективных величин с использованием вариационных методов, выражают, например: вероятность нахождения n точек с положениями $r^n = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n\}$ в фазе i для статистически неоднородной среды; вероятность нахождения точки с положением $\vec{r}_1$ во внешней области по отношению к частицам фазы и любых n частиц с координатами r^n ; вероятность нахождения точек на границе раздела; вероятность нахождения ближайшего соседа на радиальном расстоянии r от начала координат. Каждый тип таких функций зависит от взаимного расположения n точек внутри представительного объёма. Границы эффективных свойств, как правило, характеризуются числом точек, участвующих в корреляционных функциях [79].

Усовершенствованные границы, разработанные позднее и более жёсткие, чем традиционные границы Хашина–Штрикмана, зависят не от долей объёма, а от моментных функций более высокого порядка. Трёхточечные границы были предложены в работах [4, 76, 79, 288–291]. Mikdam и M. Baniassadi [228, 292–294] применили сильноконтрастную формулировку для предсказания эффективной электрической и теплопроводности двухфазных композитов с использованием двухточечных и трёхточечных корреляционных функций. Текущим ограничением является то, что в случае сильной неоднородности микроструктуры эти границы могут оказаться неэффективными, поскольку они имеют тенденцию к расходимости при увеличении контраста между свойствами составляющих [178, 295]. Большой объём работ по разработке вариационных оценок эффективных

свойств неоднородных сред выполнен Р.Р. Castaneda [296–298]; новейшие достижения в этой области, а также обзор предыдущих исследований приведены в [299].

С целью упрощения моделирования реальная стохастическая структура может быть заменена некоторой специфической моделью, которая затем анализируется. Среди таких заменителей можно отметить: среды фрактального типа на основе сферических или цилиндрических оболочечных включений [300, 301], двухфазные композиты со статистически эквивалентными фазами [302], регулярные структуры [303–305], элементарные ячейки со случайно распределёнными включениями [306, 307] или перколяционные модели [308].

Существует множество других методов гомогенизации, которые используют различные инструменты для описания особенностей микроструктуры, а также линейного и нелинейного поведения материалов. Например, А. Rasool и Н. Boehm [309] сравнивали влияние формы неоднородностей на эффективные линейно-упругие, термоупругие и теплопроводные характеристики композитов. Klusemann [12] исследовал три стратегии учета неоднородностей неэллиптической формы в контексте метода гомогенизации: методы среднего поля в сочетании с аналитическими выражениями для тензора Эшелби, метод Мори–Танаки в комбинации с подходом замещающего тензора, а также прямую конечно-элементную дискретизацию микроструктур. Другие статистические модели, ориентированные на локальный отклик, основаны на теории перколяции и анализе Вейбулла [310–312] и также могут использоваться для установления связи между микро- и макросвойствами в зависимости от статистической информации о микроструктуре. Спектральные методы, включающие микроструктурные моментные функции, используют спектральные представления функций распределения, которые статистически

характеризуют внутреннюю структуру представительных объёмов и связывают эти представления с макромасштабными эффективными свойствами с помощью существующих схем гомогенизации [81]. Обзор многомасштабных методов моделирования механических и термомеханических характеристик композитов можно найти, например, в [313].

1.5 Статистическое описание напряженно-деформированного состояния в неоднородных средах

Проблема прогнозирования эффективных свойств неоднородных сред в некотором приближении может быть решена с использованием лишь одноточечных статистических дескрипторов. Однако модели разрушения и нелинейный анализ связаны с особыми характеристиками локальных полей напряжений и деформаций, где необходимо учитывать микромасштабные флуктуации. Значимость флуктуаций напряжений подробно обсуждается в работах [85, 286] для широкого класса нелинейных задач микромеханики, таких как пластичность, повреждение, вязкость или ползучесть. Особое внимание следует уделять границам между компонентами и их окрестностям, так как именно они чаще всего являются местами зарождения разрушения. Случайная структура неоднородных материалов приводит к необходимости анализа большого числа реализаций системы [295]. Чтобы этого избежать, распределение полей в случайных структурах может быть оценено через статистические моменты полей напряжений и деформаций, которые могут быть получены либо для представительного объёма, либо отдельно для его составляющих, а также для пограничной зоны между матрицей и включениями. В этом случае могут применяться те же методы, что и для анализа эффективных свойств.

Многоточечные статистические моменты стохастических полей напряжений и деформаций используются в качестве характеристик деформационных процессов в компонентах материала. Статистические методы, использующие многоточечные моментные функции для описания взаимодействия составляющих, широко распространены в микромеханике материалов со случайной структурой [77, 78, 179, 192, 195, 198, 314–316].

Таким образом, описанный выше флуктуационный подход, а также метод интегральных уравнений могут быть применены для вычисления статистических дескрипторов локальных полей напряжений и деформаций в микроструктуре. Общая схема вычисления моментов второго порядка случайных упругих полей для двухфазного композита с использованием флуктуационного подхода представлена, например, в работе [295]. Шермергор [67], Kroener [75] и Beran [317] разработали статистические формулировки, связывающие моментные функции со свойствами многокомпонентных материалов.

Общая схема расчета моментов второго порядка случайных упругих полей в случае композита с использованием метода флуктуаций представлена в работе [295]. Для некоторых случаев детерминированных структур было предложено несколько точных решений для моментов второго порядка поля напряжений [78]. Модели для сред с регулярной структурой обсуждались в [318, 319]. Их ограничения связаны с отсутствием учёта пространственного распределения компонентов, которое может существенно влиять на локальные напряжения. Точная оценка всех компонентов второго момента тензора напряжений для эллипсоидального включения приведена в [320], где было показано, что этот момент является постоянным внутри включений, если предположить однородность эффективных полей напряжений в окрестностях каждого включения. Ограничения этих решений связаны с недостаточным учетом реального случайного пространственного распределения

составляющих, которое может оказывать существенное влияние на локальные напряжения. Явные соотношения для второго момента напряжений были получены в работе [321] и использовали взаимодействия второго и третьего порядка между включениями. Важность флуктуаций напряжений подробно обсуждается в [85, 286] для широкого класса нелинейных проблем микромеханики, таких как пластичность, вязкость или ползучесть.

Для расчета флуктуаций напряжений для представительного объема с изотропными компонентами была разработана комбинация флуктуационного метода и вариационного принципа [322], основанного на оценке флуктуаций энергетической функции вследствие изменения свойств материала [323, 324]. Хи [325] использовал обобщенный вариационный принцип для разложения краевой задачи со случайной микроструктурой на медленную (детерминированную) и быструю (стохастическую) задачу. Рекурсивный подход для расчета функции плотности вероятности полей напряжений описан в [326]. Численный статистический анализ на уровне масштаба включений был выполнен в работе [327]. Метод флуктуаций обычно подходит для описания неоднородных сред со слабым контрастом свойств [108, 328], и дает корректные результаты в случае небольших различий в свойствах компонентов [283] или при малой концентрации неоднородностей [109, 110].

Метод интегральных уравнений позволяет оценивать вторые моменты напряжений и деформаций в компонентах. Он предполагает, что описание неоднородной среды может быть реализовано в рамках структурно-феноменологического подхода, когда механические свойства микроструктурных компонентов задаются традиционными феноменологическими уравнениями и критериями, а микроскопические поля деформаций и напряжений вычисляются с использованием решений стохастических краевых задач с быстро осциллирующими коэффициентами.

Флуктуации перемещений могут быть получены интегрированием с помощью метода функции Грина:

$$u'_i(\vec{r}) = \int_V G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}_1) \frac{\partial P_{jn}(\vec{r}_1)}{\partial x_{1n}} dV. \quad (1.14)$$

Здесь $u'_i(\vec{r})$ обозначает флуктуацию перемещений, $G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}_1)$ функцию Грина, $P_{jn}(\vec{r}_1)$ представляет собой функционал, содержащий константы из граничных условий, а также тензор жёсткости. Подробнее о данном решении рассказывается в главе 2. Структура функционала различается в зависимости от метода решения.

Изучение поведения композитов со случайными структурами в этих рамках было заложено работами Лифшица и Розенцвейга [65], посвящёнными стохастическим краевым задачам теории упругости для поликристаллических сред. Было предложено множество способов замыкания интегральных уравнений: метод сингулярных приближений [67, 94, 329], гипотеза сильной изотропии [330] и метод условных моментов [331], корреляционное и многоточечное приближение [72, 95, 134]. Некоторые из этих методов описаны ниже.

Если компоненты композита изотропны и представительный объём может макроскопически рассматриваться как изотропная среда, применяется гипотеза сильной изотропии [330]. Она предполагает, что при вычислении двухточечных моментов можно пренебречь компонентами, зависящими от выбора направления между двумя точками. Метод условных моментов для случайных композитов основан на предположении, что флуктуации случайных полей внутри компонента достаточно малы. Это позволяет свести задачу к системе линейных алгебраических уравнений для одноточечных моментов. Такая модифицированная задача решается в двухточечном приближении с использованием статистической информации и ряда

упрощающих гипотез о характере распределения включений в объёме матрицы.

Для некоторого класса моделей стохастических неоднородных сред периодическая структура может рассматриваться как реализация случайной структуры. Метод периодических компонентов предполагает, что усреднённые части разложения полей соответствуют периодической структуре [94, 95]. Такое представление позволяет учитывать доленое содержание, связность и геометрическую форму компонентов, которые являются общими как для случайных, так и для периодических структур.

Метод локальной аппроксимации основан на специфике ближних взаимодействий включений в матричных композитах, согласно которой задача деформирования неоднородной среды сводится к более простой задаче деформирования неограниченной области с ансамблем из небольшого числа включений. Особенность локальных взаимодействий не связана с конкретным характером взаимного расположения включений, а также с их формой, поэтому метод был применён для композитов со случайными структурами [102]. Гипотеза предельной локальности корреляционных функций позволяет получить одноточечное приближение стохастических краевых задач и избежать вычисления интегралов по области статистической зависимости корреляционных функций.

Многие стохастические методы основаны на предположении статистической независимости случайных полей физических и механических свойств композитов, когда каждой геометрической точке сопоставляется зерно неоднородности, и флуктуации физических и механических свойств в соседних зернах не коррелируют между собой. Таким образом, могут учитываться только одноточечные статистические характеристики случайной структуры. Для композита с детерминированными свойствами структурных элементов все одноточечные структурные статистические характеристики

определяются относительной объёмной концентрацией элементов при допущении однородности и эргодичности случайных полей.

В работе Т.Д. Шермергора [67] предложены ряд методик для слабоконтрастных неоднородных сред. В сингулярном приближении сохраняется только формальная составляющая вторых производных функции Грина для однородной неограниченной среды. Корреляционное приближение также использует формальную составляющую, однако учитывает только парные взаимодействия, поэтому корреляционные функции порядка выше второго не рассматриваются. В целом корреляционная теория может применяться, когда среднеквадратичные отклонения структурных упругих модулей малы по отношению к их математическому ожиданию. Корреляционное приближение было развито в работах [72, 96]. Стохастические методы в корреляционном приближении дают хорошие результаты при малой разнице в модулях упругости композита или слабой анизотропии. Полное корреляционное приближение предполагает учёт всех членов, полученных при решении стохастической краевой задачи в первом приближении, включая те, что содержат корреляционные функции порядка выше второго. Статистические характеристики в полном корреляционном приближении и втором приближении решения были вычислены в работах [96, 113–115].

С учётом как парного, так и тройного взаимодействия включений могут быть получены явные соотношения для вторых моментов напряжений [332]. Вторые моменты напряжений могут использоваться в статистических моделях нелинейного механического поведения и разрушения неоднородных сред. Ключевая роль этих моментов в нелинейном анализе объясняется тем, что поверхность текучести, критерий разрушения на границе включений и скорость высвобождения энергии являются квадратичными функциями распределения локальных напряжений [332]. Так, Саката [333] рассматривал

прогнозирование вероятности микроструктурного разрушения с использованием метода Монте-Карло, стохастической гомогенизации на основе возмущений и стохастического многомасштабного анализа напряжений. Мишнаевский [334] исследовал влияние кластеризации частиц на эффективный отклик и эволюцию повреждений в композитах Al/SiC и применял вероятностный анализ для определения разрушения матрицы и материалов.

Известные недостатки статистических методов заключаются в том, что в большинстве случаев они не предназначены для получения точных результатов, ограничиваясь оценками на основе статистических инструментов. Кроме того, микроструктура неоднородных материалов в рамках статистического описания рассматривается как статическая, хотя некоторые подходы могут быть обобщены и на задачи с изменяющейся структурой.

Статистические дескрипторы и меры являются важными элементами методов анализа механического отклика, которые обеспечивают обратное проектирование для оптимизации характеристик неоднородных материалов. Эффективность конкретной статистической метрики связана со способностью отражать наиболее значимые особенности микроструктуры. С расширением доступности вычислительных мощностей статистические подходы позволяют учитывать взаимодействия более высоких порядков и открывают возможность совершенствования существующих механических теорий с помощью более точных микроструктурных статистических инструментов.

Представленный в данной главе литературный обзор опубликован в обзорной статье [141].

ГЛАВА 2. Стохастические краевые задачи структурно-неоднородных сред и их решение в многоточечном приближении

Решение стохастической краевой задачи в постановке применительно к представительным объемам неоднородных материалов зависит от механических свойств компонентов, которые входят в функцию Грина, и микроструктурной морфологии представительного объема, которая формализуется n -точечными моментными функциями, определяющими в данной постановке пространственное расположение и взаимодействие составляющих внутри представительного объема. В предыдущих работах, посвященных вышеописанному стохастическому подходу, отмечалось, что двухточечные корреляции достаточны для отражения микромасштабного распределения полей только в том случае, если контраст между свойствами в микроструктуре ограничен умеренно низкими значениями. Более точные морфологические аспекты могут быть учтены с учетом моментных функций более высокого порядка. Такие корреляции также следует учитывать для повышения точности локализации в случае средне- и высококонтрастных сред.

2.1. Стохастическая краевая задачи теории упругости

Краевую задачу теории упругости с граничными условиями в перемещениях можно определить следующим образом:

$$\begin{aligned}\sigma_{ij,j}(\vec{r}) &= 0, \\ \varepsilon_{ij}(\vec{r}) &= \frac{1}{2} \left(u_{i,j}(\vec{r}) + u_{j,i}(\vec{r}) \right), \\ \sigma_{ij}(\vec{r}) &= C_{ijkl}(\vec{r}) \varepsilon_{kl}(\vec{r}), \\ u_i(\vec{r})|_{\vec{r} \in S_V} &= e_{ij} r_j,\end{aligned}\tag{2.1}$$

где подстрочный символ $,j$ обозначает производную $\frac{\partial}{\partial x_j}$ относительно координаты радиус-вектора, $C_{ijkl}(\vec{r})$ тензор жёсткости. Граничные условия на поверхности представительного объема обеспечивают однородность макромасштабных однородных деформаций, r_j координаты точек на внутренней поверхности объема S_V .

Адгезия на границе раздела между компонентами представительного объема считается идеальной:

$$\begin{aligned} u_i^{(M)}(\vec{r}) \Big|_{\vec{r} \in S_M} &= u_i^{(I)} \Big|_{\vec{r} \in S_I}(\vec{r}), \\ \sigma_{ij}^{(M)} n_j &= \sigma_{ij}^{(I)} n_j, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где S_M внутренняя поверхность матрицы, S_I внешняя поверхность фазы включения, n_j нормаль к граничной поверхности между компонентами.

Решение поставленной задачи может быть найдено относительно флуктуаций поля перемещений $u'_i(\vec{r})$. Система уравнений стохастической краевой задачи (2.1) может быть сведена к одному дифференциальному уравнению:

$$\left(C_{ijkl}(\vec{r}) \frac{1}{2} (u_{k,l}(\vec{r}) + u_{l,k}(\vec{r})) \right)_{,j} = 0. \quad (2.3)$$

Симметрия тензора жесткости позволяет дальше упростить последнее выражение:

$$(C_{ijkl}(\vec{r}) u_{k,l}(\vec{r}))_{,j} = 0. \quad (2.4)$$

Применяя определения флуктуационного подхода, уравнение (2.4) может быть выражено через средние значения и колебания:

$$[(\langle C_{ijkl} \rangle + C'_{ijkl}(\vec{r}))(\langle u_k(\vec{r}) \rangle_{,l} + u'_{k,l}(\vec{r}))]_{,j} = 0. \quad (2.5)$$

С учетом граничных условий и усреднения тензора деформаций:

$$\langle \varepsilon_{kl}(\vec{r}) \rangle = e_{kl} = \frac{1}{2} (\langle u_k(\vec{r}) \rangle_{,l} + \langle u_l(\vec{r}) \rangle_{,k}), \quad (2.6)$$

уравнение (2.5) можно переставить следующим образом:

$$(\langle C_{ijkl} \rangle u'_{k,l}(\vec{r}))_{,j} = -(C'_{ijkl}(\vec{r}) e_{kl} + C'_{ijkl}(\vec{r}) u'_{k,l}(\vec{r}))_{,j}. \quad (2.7)$$

Для упругих двухфазных неоднородных сред, представленных матрицей и включениями, тензор жесткости можно выразить с помощью индикаторной функции:

$$C_{ijkl}(\vec{r}) = \lambda(\vec{r}) C_{ijkl}^I + (1 - \lambda(\vec{r})) C_{ijkl}^M, \quad (2.8)$$

где $C_{ijkl}^{(I)}$ и $C_{ijkl}^{(M)}$ это тензоры жесткости компонентов включений и матрицы, соответственно, которые в изотропном случае могут быть представлены как:

$$C_{ijkl}^{(I)} = \lambda_I \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu_I (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad C_{ijkl}^{(M)} = \lambda_M \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu_M (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}),$$

λ_I , λ_M , μ_I , μ_M константы Ламе матрицы и включений, которые определяются как $\lambda_I = \frac{E_I \nu_I}{(1+\nu_I)(1-2\nu_I)}$, $\mu_I = \frac{E_I}{2(1+\nu_I)}$, где E_I упругий модуль, ν_I коэффициент Пуассона включений. Выражения для λ_M и μ_M аналогичны.

Для двухфазной среды индикаторная функция $\lambda(\vec{r})$ определяется как:

$$\lambda(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in V_I \\ 0, & \vec{r} \in V_M \end{cases}, \quad (2.9)$$

где V_I пространственный объем фазы включений, V_M пространственный объем фазы матрицы.

Усреднение уравнения (2.8) дает постоянный тензор:

$$\langle C_{ijkl}(\vec{r}) \rangle = \langle C_{ijkl} \rangle = p C_{ijkl}^I + (1 - p) C_{ijkl}^M, \quad (2.10)$$

где $p = \langle \lambda(\vec{r}) \rangle$ объемная доля включений.

Правая часть уравнения (2.7) может быть обозначена как тензор $P_{ij,j}(\vec{r})$:

$$\langle C_{ijkl} \rangle u'_{k,l,j}(\vec{r}) = -P_{ij,j}(\vec{r}). \quad (2.11)$$

Уравнение (2.11) можно считать упругой краевой задачей с тензором жесткости $\langle C_{ijkl} \rangle$, перемещениями $u'_k(\vec{r})$ и объемными силами $P_{ij}(\vec{r})$. Если представительный объем значительно больше, чем его микроструктурные фазы, уравнение (2.11) можно решить методом функций Грина [74, 295, 325, 335]. По определению функция Грина удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\langle \mathbf{C} \rangle \mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r}_1) = -\delta \Delta(\vec{r} - \vec{r}_1). \quad (2.12)$$

Здесь $\Delta(\vec{r} - \vec{r}_1)$ дельта-функция, δ дельта Кронекера.

Таким образом, решение стохастической краевой задачи для флуктуаций перемещений принимает форму интегрально-дифференциального уравнения, содержащего функцию Грина $G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}_1)$:

$$u'_i(\vec{r}) = \int_{V_1} G_{ij}(\vec{r}, \vec{r}_1) \frac{\partial P_{jn}(\vec{r}_1)}{\partial x_{1n}} dV_1. \quad (2.13)$$

2.2. Последовательное разложение решения стохастической краевой задачи

В исследованиях, посвященных статистическому анализу неоднородных материалов, Е. Kröner предложил формулу бесконечного приближения для тензора упругой жёсткости на основе решения стохастической краевой задачи, выведя тем самым общую форму решения задачи гомогенизации [75, 91, 336]. По аналогии последовательное приближение может быть использовано для получения выражений для флуктуаций перемещений.

Уравнение (2.13) содержит флуктуации $u'_i(\vec{r})$ как в левой, так и в правой части, таким образом, оно может быть представлен в рекуррентной форме:

$$u_{i,j}^{(\chi)}(\vec{r}) = \int_{V_1} G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) \left[C'_{mnkl}(\vec{r}_1) e_{kl} + \right. \\ \left. C'_{mnkl}(\vec{r}_1) u_{k,l}^{(\chi-1)}(\vec{r}_1) \right]_{,1n} dV_1, \quad (2.14)$$

где χ порядок аппроксимации. В первом приближении флуктуации перемещений в правой части уравнения (2.14) опускаются:

$$u_{i,j}^{(1)}(\vec{r}) = e_{kl} \int_{V_1} G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) \left(C'_{mnkl}(\vec{r}_1) \right)_{,1n} dV_1. \quad (2.15)$$

Решение в этой форме с некоторыми допущениями используется в методах корреляционного и сингулярного приближения [67, 72, 113, 137, 329].

Во втором приближении результат, полученный из первого приближения, подставляется в правую часть уравнения (2.14):

$$u_{i,j}^{(2)}(\vec{r}) = e_{kl} \int_{V_1} G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) \left(C'_{mnkl}(\vec{r}_1) \right)_{,1n} dV_1 + \\ e_{oq} \int_{V_1} \int_{V_{11}} G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) \left[C'_{mnkl}(\vec{r}_1) G_{kf,l}(\vec{r}_1, \vec{r}_{11}) \left(C'_{fsoq}(\vec{r}_{11}) \right)_{,11s} \right]_{,1n} dV_{11} dV_1. \quad (2.16)$$

Флуктуации тензора жесткости $C'_{ijkl}(\vec{r})$ можно связать с флуктуациями индикаторной функции соотношением:

$$C'_{ijkl}(\vec{r}) = \lambda'(\vec{r})(C^I_{ijkl} - C^M_{ijkl}) = \lambda'(\vec{r})\bar{C}_{mnkl}, \quad (2.17)$$

Продолжая дальнейшие приближения уравнения (2.14), как показано в уравнении (2.16), последовательное разложение решения может быть представлено в следующем виде (записано в тензорной форме):

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}'(\vec{r})_1 = & \\
& e\bar{C} \int_V \mathbf{G}_{,0}(\vec{r}, \vec{r}_1) \lambda'(\vec{r}_1)_{,1} dV + \\
& + e\bar{C}\bar{C} \int_V \mathbf{G}_{,0}(\vec{r}, \vec{r}_1) \mathbf{G}_{,1,1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\lambda'(\vec{r}_1) \lambda'(\vec{r}_2) \right)_{,1,2} dV_2 dV_1 + \\
& + e\bar{C}\bar{C}\bar{C} \int_V \mathbf{G}_{,0}(\vec{r}, \vec{r}_1) \mathbf{G}_{,1,1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \mathbf{G}_{,2,2}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left(\lambda'(\vec{r}_1) \lambda'(\vec{r}_2) \lambda'(\vec{r}_3) \right)_{,1,2,3} dV_1 dV_2 dV_3 \\
& + \dots,
\end{aligned} \tag{2.18}$$

где произведения флуктуаций индикаторной функции $\lambda'(\vec{r}_1)\lambda'(\vec{r}_2)\lambda'(\vec{r}_3) \times \dots$ образуют n -точечные структурные моментные функции $K^{(n)}$.

В дальнейших численных примерах будет использовано решение во втором приближении (2.16), в котором используются моментные функции $K^{(n)}$ вплоть до пятого порядка.

Аналитическое решение интегралов в уравнениях (2.13) и (2.18) требует знания функции Грина для рассматриваемой среды. Специальная функция Грина (называемая также тензором Кельвина-Сомильяны [337]) была получена для композита с изотропными компонентами [74, 179, 295]:

$$\begin{aligned}
G_{kn}(\vec{r}, \vec{r}_1) = & \frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle|\vec{r}-\vec{r}_1|} \left(\frac{\langle\lambda\rangle+\langle 3\mu\rangle}{\langle\lambda+2\mu\rangle} \delta_{kn} + \frac{\langle\lambda\rangle+\langle\mu\rangle}{8\pi\langle\mu\rangle\langle\lambda+2\mu\rangle} (x_k - \right. \\
& \left. x_{1[k]})(x_n - x_{1[n]}) \right),
\end{aligned} \tag{2.19}$$

где $\langle\lambda\rangle = \lambda_I p + \lambda_M(1-p)$, $\langle\mu\rangle = \mu_I p + \mu_M(1-p)$ усредненные константы Ламе компонентов. Согласно определению, такая функция удовлетворяет равенство:

$$\langle C_{ijkl} \rangle G_{kn,jl}(\vec{r}, \vec{r}_1) = -\delta_{in} \delta(\vec{r} - \vec{r}_1). \tag{2.20}$$

Как отмечалось в главе 1, функция Грина имеет сингулярность в точке $\vec{r} = \vec{r}_1$. Методы ее разрешения описаны в [75, 78, 112, 283]. Одна из методик предполагает, что интегралы решения стохастической краевой задачи могут

быть выражены через вторые производные функции Грина с помощью преобразования Стильтеса [338].

Идентичное преобразование Стильтеса двух функций $f(x)$ и $g(x)$ по интервалу (a, b) определяется как:

$$\Psi(t) \equiv \int_a^b f(t-x)g'(x)dx \equiv \int_a^b g(t-x)f'(x)dx. \quad (2.21)$$

Это преобразование может быть применено для «переноса» производной от корреляционных функций к функции Грина. Например, уравнение (2.16) тогда можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{(2)}(\vec{r}) = e_{kl}\bar{C}_{mnkl} \int_{V_1} G_{im,jn}(\vec{r}, \vec{r}_1) \lambda'(\vec{r}_1) dV_1 + \\ + e_{oq}\bar{C}_{mnkl}\bar{C}_{fsoq} \int_{V_1} \int_{V_2} G_{im,jn}(\vec{r}, \vec{r}_1) G_{kf,ls}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \lambda'(\vec{r}_1) \lambda'(\vec{r}_2) dV_2 dV_1. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Целью данной операции является преобразование выражений под интегралом во вторую производную функции Грина, которая может быть разложена на сингулярные и формальные части:

$$G_{kf,ls}(\vec{r}, \vec{r}_1) = G_{kf,ls}^{(s)}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{kf,ls}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_1). \quad (2.23)$$

Это позволяет разделить область интегрирования на сингулярный и формальный субдомены. Для этих двух частей были получены точные выражения [74, 179, 295]:

$$G_{kf,ls}^{(s)}(\vec{r}, \vec{r}_1) = -\frac{\delta(\vec{r}-\vec{r}_1)}{3\langle\mu\rangle} \left(\delta_{kf}\delta_{ls} - \frac{1}{5}\kappa\delta_{kf,ls} \right) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_1)g_{kf,ls}, \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} G_{kf,ls}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_1) = \frac{1}{8\pi\langle\mu\rangle|\vec{r}-\vec{r}_1|^3} \left((2-\kappa)\delta_{kf}(3n_f n_s - \delta_{fs}) - \right. \\ \left. -\kappa[3(n_{kf}n_{ls} + n_{kl}n_{fs} + n_{ks}n_{fl} + n_{fs}n_{kl} + n_{fl}n_{ks}) - 2I_{kf,ls} - 15n_k n_f n_l n_s] \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

где $\kappa = \frac{\langle\lambda+\mu\rangle}{\langle\lambda+2\mu\rangle}$, $n_i = \frac{x_i-x_{1i}}{|\vec{r}-\vec{r}_1|}$, $n_{ij} = x_i x_j$, $I_{kf,ls} = 0.5(\delta_{kl}\delta_{fs} + \delta_{ks}\delta_{fl})$.

Тогда интегралы содержащие функции Грина могут быть представлены как:

$$\begin{aligned} \int_V G_{kf,ls}(\vec{r}, \vec{r}_1) K^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1) dV = \\ \int_{V_0} G_{kf,ls}^{(s)}(\vec{r}, \vec{r}_1) K^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1) dV + \int_{V-V_0} G_{kf,ls}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_1) K^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1) dV, \end{aligned} \quad (2.26)$$

где V_0 область сингулярности.

Используя определение обобщенной функции Дирака

$$\int \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) f(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 = f(\vec{r}), \quad (2.27)$$

сингулярное слагаемое становится постоянным тензором:

$$\begin{aligned} \int_V G_{kf,ls}(\vec{r}, \vec{r}_1) K^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1) dV = g_{kf,ls} D^{(2)} + \\ \int_{V-V_0} G_{kf,ls}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_1) K^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1) dV. \end{aligned} \quad (2.28)$$

В результате формальная часть области интегрирования исключает сингулярность и ее окрестности, в то время как сингулярная часть заменяет интегрирование по сингулярности. Предложенный Т.Д. Шермергором сингулярный подход к решению стохастической краевой задачи предполагает, что формальная часть уравнения (2.28) пренебрежимо мала, оставляя для рассмотрения только сингулярную часть и избегая многомерного интегрирования [92].

Аналитическая форма многоточечного решения стохастической краевой задачи используется в стохастическом подходе для получения статистических характеристик для случайных полей напряжений и деформаций в представительном объеме.

2.3. Определение значений структурных многоточечных моментных функций

В общем случае многокомпонентной среды моментная функция n -го порядка определяется через случайную индикаторную функцию, которая может быть задана для представительного объема в следующем виде:

$$K_{\alpha}^{(n)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \langle \lambda'_{\alpha}(\vec{r}_1) \dots \lambda'_{\alpha}(\vec{r}_n) \rangle, \quad (2.29)$$

где $\lambda_{\alpha}(\vec{r})$ индикаторная функция фазы α , значения которой равны 1 если позиция радиус-вектора $\vec{r}$ соответствует фазе α , и 0 в любом другом случае; величина $\lambda_{\alpha}(\vec{r})$ представляет собой усреднение по представительному объему, равное объемной доле фазы α .

Поскольку индикаторная функция $\lambda_{\alpha}(\vec{r})$ статистически однородна и изотропна, корреляционные функции $K^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ зависят только от расстояния между радиус-векторами $|\vec{r}_i - \vec{r}_n|$. Когда $|\vec{r} - \vec{r}_1| = |\vec{r} - \vec{r}_2| = \dots = |\vec{r}_{n-1} - \vec{r}_n| = 0$, значение моментной функции $K^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ эквивалентно центральному моменту n -го порядка $D^{(n)}$. Этот момент обычно используется в качестве параметра нормализации:

$$f^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots) = \frac{K^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)}{D^{(n)}}. \quad (2.30)$$

При такой нормализации значения моментных функций для разных представительных объемов равны 1 когда расстояния между аргументами равны нулю (радиус-векторы совпадают), что позволяет напрямую сравнивать морфологию различных структур между собой.

Теоретически бесконечное число моментных функций полностью характеризует геометрию случайной структуры. При этом некоторые из функций более отзывчивы к изменению тех или иных геометрических особенностей. Например, функция второго порядка чувствительная к

относительным положениям включений; функция третьего порядка характеризует форму включений; функция четвертого порядка реагирует на кластеризацию включений, а также на их распределение по размерам.

Существует несколько методов для определения поля значений индикаторной функции, являющейся ядром моментных функций. Традиционный метод получения морфологических статистических дескрипторов основан на дискретизации геометрии представительного объема при помощи сетки с равным шагом, в узлах которой определяется наличие фаз. Значения многоточечных статистических дескрипторов зависят от положения радиус-векторов в представительном объеме и определяются как сопоставление того или иного пространственного состояния в различных точках. В случае дискретизации представительный объем характеризуется конечным числом точек. Минимальный шаг дискретизации определяет рост значений аргумента статистических функций. Таким образом, для получения значений дескрипторов необходимо получить поле значений индикаторной функции в конечном числе точек, что, при выборе оптимального шага дискретизации, дает результат с приемлемой точностью.

Значения многоточечных статистических дескрипторов зависят от положения радиус-векторов в представительном объеме и определяются как сопоставление того или иного пространственного состояния в различных точках. В случае воксельной дискретизации, представительный объем характеризуется конечным числом точек (вокселей). Размер одного вокселя определяет минимальный шаг дискретизации, а также шаг роста значений аргумента статистических функций. Минус этого подхода состоит в том, что для многоточечных статистических дескрипторов конфигурация радиус-векторов и расстояние между ними определяется шаблон сетки, что создает трудности при расчете ряда метрик с нечетным количеством радиус-векторов и требованием их равноудаленности друг от друга. Также, при мелкой частоте

дискретизации этот метод требует значительных вычислительных затрат. В данной работе были реализованы алгоритмы дискретизации геометрических областей с использованием сеток с разной формой и конфигурацией элементов. В частности, были использованы три типа сетки: с трехмерными элементами тетраэдральной и кубической формы, а также двумерными треугольными элементами, обеспечивающими оболочечную дискретизацию. Для выполнения этого условия для моментных функций второго и четвертого порядков используется кубическая сетка (рисунок 2.1а), для функций третьего порядка подходит шестиугольная сетка (рисунок 2.1б), функции пятого порядка (рисунок 2.1в) построены на центрированной кубической сетке.

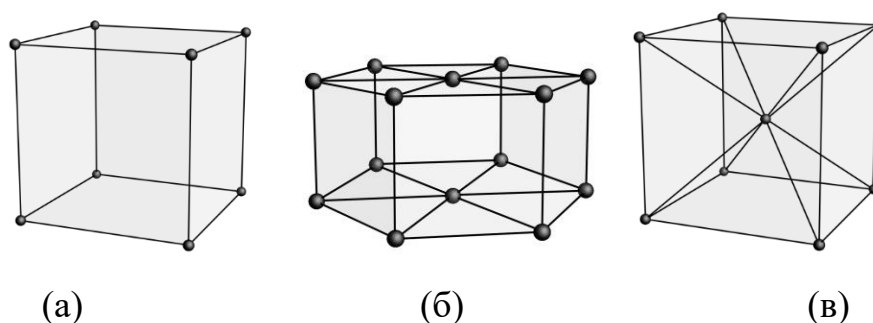


Рисунок 2.1 – Схематическое представление улов сетки

Дискретизация элементами кубической формы обеспечивает реализацию так называемой воксельной модели, когда весь представительный объем разбивается элементами равных размеров, каждому из которых присваивается принадлежность к первой или второй фазе. Как правило, такой тип дискретизации получают как результат при экспериментальном исследовании микроструктуры реальных образцов материалов.

Для создания воксельных моделей происходило наполнение с заданным шагом трехмерного бинарного координатного массива, содержащего информацию о наличии первой или второй фазы в каждой дискретной точке, для чего тестировалась принадлежность каждой точки исходной геометрической области одной из фаз с использованием ее аналитического

представления. В рамках данной работы были созданы программные алгоритмы для воксельной дискретизации трехмерных аналитически заданных геометрических областей, интерполированных областей, а также трехмерной геометрии, заданной с помощью основных геометрических форм (сферы, эллипсоиды, цилиндры и другие) [165, 174–176].

Разработка методик анализа представительных объемов с использованием воксельной дискретизации с практической точки зрения дает возможность производить анализ не только модельных структур, но также двумерных и трехмерных массивов экспериментальных данных, полученных, например, на основе сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, рентгеновской микро- и нанокомпьютерной томографии. Экспериментальные данные микроструктурных изображений, путем установки порогового значения, могут быть сведены к двоичному массиву, к которому затем применимы подходы, разрабатываемые в рамках настоящего исследования.

Альтернативный подход к нахождению значений моментных функций основан на оригинальном методе, предложенном в работах под руководством С. Калидинди [80, 339], который связан с использованием Фурье-анализа. В отличие от предыдущего метода, данный подход требует на порядок меньше вычислительных ресурсов, но его точность в некоторых случаях может быть недостаточна.

В данной работе предложены два новых способа расчета статистических дескрипторов, зависящих от множества радиус-векторов. Первый из них основан на непрерывном численном интегрировании по региону [164], относящемуся к той или иной фазе неоднородной структуры. Второй – на использовании методов машинного обучения.

В первом случае, в отличие от других описанных подходов, в которых для получения значений функций в точках требуется дискретизация геометрии

с фиксированным шагом, для каждого радиус-вектора принадлежность к той или иной фазе определяется с использованием численных методов и аналитической геометрии. При этом значения функций получаются путем интегрирования по геометрическому региону, а изменение положения радиус-векторов происходит не скачкообразно, а плавно, с приращением, соответствующим методу интегрирования:

$$K_{\alpha}^{(n)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \langle \int_V (\lambda_{\alpha}(\vec{r}_1) - p)(\lambda_{\alpha}(\vec{r}_2) - p) \dots (\lambda_{\alpha}(\vec{r}_n) - p) dV \rangle. \quad (2.31)$$

Таким образом, положение радиус-векторов не привязано к точкам дискретизации структуры, что позволяет реализовывать любую их многоточечную комбинацию при расчете статистических характеристик. Это особенно полезно при необходимости выполнения условия одинакового расстояния между радиус-векторами. Например, трехточечная моментная функция с таким условием не может быть рассчитана на стандартной квадратной (пиксельной) или кубической (воксельной) сетке, однако, вычисляется с помощью предложенного метода.

Точность численной реализации подхода определяется погрешностью численного интегрирования и зависит от выбранной стратегии интегрирования и метода. Установлено, что в качестве оптимального с точки зрения погрешности результатов и скорости работы можно использовать адаптивный метод Монте-Карло.

Несмотря на достигнутые успехи в оптимизации и адаптации численных подходов, вычисление многоточечных статистических дескрипторов для двумерных и трехмерных представительных объемов большого размера с использованием численных методов остается ресурсоемкой задачей. Для получения качественных оценок для статистических дескрипторов в данной работе предложен также оригинальный подход, основанный на использовании методов машинного обучения. Как известно, нейронные сети могут быть использованы для классификации объектов по определенным признакам.

Применительно к задачам анализа морфологии, они могут быть использованы для определения вида статистических дескрипторов по типу геометрии структуры. В данном случае процедура получения статистических дескрипторов для произвольной неоднородной среды заключается в следующем:

- 1) Нейронная сеть обучается на множестве представительных объемов неоднородных сред, для которых получены статистические дескрипторы.
- 2) Структура, для которой требуется определить статистические дескрипторы, выступает в роли входных данных для нейронной сети.
- 3) При помощи оптимизационных алгоритмов нейронная сеть выдает вид статистического дескриптора, наиболее соответствующий входной структуре, исходя из результатов предшествующего анализа.

Особенность данного подхода состоит в том, что для создания базы структур для обучения, а также для самого процесса обучения сети требуются предварительно затраченные вычислительные ресурсы. Однако, скорость выдачи результата для статистических дескрипторов новой среды намного превосходит все известные альтернативные методы. Предполагается, что геометрия новой среды качественно не отличается от предварительно анализируемых. Точность данного метода полностью зависит от размера выборки, используемой для обучения нейронной сети. Также, такой подход не позволяет получить абсолютно точные значения статистических дескрипторов для конкретной структуры. Однако, в некоторых случаях для оценки морфологических свойств таких результатов может быть достаточно.

Для численного решения стохастических краевых задач необходимо аналитическое представление статистических характеристик. Для нормализованных n -точечных моментных функций использовалась следующая модель аппроксимирующего выражения:

$$f_{\lambda}^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \text{Exp}[-c_1 \Sigma_n] \left(\text{Cos}[c_2 \Sigma_n] + c_3 \text{Sin}[c_2 \Sigma_n^{(2)}] \right), \quad (2.32)$$

где c_i это коэффициенты аппроксимации, которые должны быть определены,

$$\Sigma_n = |\vec{r} - \vec{r}_1| + |\vec{r} - \vec{r}_2| + \dots + |\vec{r} - \vec{r}_n| + |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| + \dots + |\vec{r}_{n-1} - \vec{r}_n|,$$

$$\Sigma_n^{(2)} = |\vec{r} - \vec{r}_1|^2 + |\vec{r} - \vec{r}_2|^2 + \dots + |\vec{r} - \vec{r}_n|^2 + |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2 + \dots + |\vec{r}_{n-1} - \vec{r}_n|^2.$$

При получении значений корреляционных функций все расстояния между точками считаются равными и увеличиваются пропорционально:

$$|\vec{r} - \vec{r}_1| = |\vec{r} - \vec{r}_2| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \dots = |\vec{r}_m - \vec{r}_n| = \Delta \vec{r}. \quad (2.33)$$

Расположение моментных функций на графике позволяет проследивать отличия между морфологической конфигурацией различных структур. При совпадении графиков моментных функций можно говорить о том, что морфологические параметры структур, описываемых этими функциями, идентичны. Соответственно, влияние морфологии на механическое поведение для таких структур также считается одинаковым. Существенные различия в положении графиков моментных функций говорят о том, что строение внутренней морфологии структур отличается, следовательно, влияния морфологии таких структур на механическое поведение также будет различным. Таким образом, можно определить изменение каких именно морфологических характеристик повлечет за собой изменения в механическом отклике представительного объема при различных видах нагружения.

2.4. Численные методы решения многомерных интегральных уравнений

Важным фактором, влияющим на работоспособность представленного подхода при использовании приближений высоких порядков, является точность используемых методов численного интегрирования. Это связано с тем, что при росте размерности интегралов в связи с увеличением порядка

приближения, возрастает значения фактора сингулярности производных функций Грина. При перемножении таких производных требуется тонкая отладка методов и правил интегрирования для отсечения зоны сингулярности без влияния на погрешность интегрирования. Так, для исследованных примеров пористых сред установлено, что использование второго приближения с описанными выше способами численного интегрирования приводит к недопустимой погрешности при объемной доле включений выше 50%. Это связано с тем, что при увеличении объемной доли, точка пересечения с осью графика абсцисс моментных функций смещается вправо, тем самым увеличивая скорость возрастания значений подынтегральной функции в области, близкой к сингулярности, тем самым увеличивая погрешность интегрирования. Таким образом, для получения надежных результатов использования методики с многоточечными статистиками высших порядков в качестве инструментов описания морфологии среды необходимо дополнительное исследование подходящих способов численного интегрирования.

Сложность численных расчетов определяется порядком приближения решения краевой задачи и методикой его получения. При расчетах в первых производных функции Грина, в первом приближении решения задачи, выражения для безусловных моментов содержат три типа интегралов различной кратности, отличающихся друг от друга подынтегральным выражением, в которое входят производные функции Грина и аппроксимирующие выражения для моментных функций. Во втором приближении количество интегралов увеличивается до восьми. При решении во вторых производных функции Грина, первое приближение также требует вычисления трех интегралов, однако во втором приближении их число возрастает до восемнадцати за счет слагаемых, представляющих собой перемножение формальной и сингулярных составляющих.

Интегрирование по объему всего тела в формулах, содержащих функцию Грина, можно заменить интегрированием по области статистической зависимости случайного поля структурных модулей упругости, то есть области, где значения моментных функций отличны от нуля. Таким образом, верхний предел интегрирования равен радиусу статистической зависимости. Численное интегрирование в уравнении (2.18) может быть выполнено с использованием вычислительных ресурсов коммерческого математического программного обеспечения, такого как Wolfram Mathematica или MATLAB.

Каждый метод интегрирования определяется стратегией и правилом. Стратегии интегрирования определяют способ разбиения области интегрирования на подобласти. Каждый элемент может иметь свое подынтегральное выражение и соответствующее ему правило интегрирования, согласно которому задаются точки, в которых вычисляется значение интеграла. Правила интегрирования предназначены для вычисления значения интеграла и погрешности в подобластях, используя, как правило, взвешенные суммы. Правило интегрирования вычисляет значения подынтегрального выражения в определяемом самим правилом наборе точек. Каждой точке x_i ставится в соответствие весовой коэффициент w_i , затем происходит оценка погрешности интеграла $\int_a^b f(x)dx$ с помощью взвешенной суммы $\sum w_i f(x_i)$.

Комбинируя стратегии и правила, можно задавать методы, наиболее подходящие для данного подынтегрального выражения. Адаптивные стратегии численного интегрирования, направленные на поиск проблемных зон домена интегрирования и концентрацию усилий на них путем их разбиения на субдомены, доказали свою эффективность для рассматриваемых типов интегралов. Адаптивные стратегии интегрирования должны быть дополнены правилом интегрирования для расчета интегрального значения и

оценки погрешности в субдоменах, а также методом разделения домена интегрирования на субдомены.

Существуют глобальная и локальная адаптивные стратегии интегрирования. Глобальная адаптивная стратегия основана на том, что из всех подобластей исходной области интегрирования выбирается подобласть с наибольшей погрешностью и делится пополам. Затем вычисляются значение интеграла и погрешность для каждой половины, и процедура повторяется для всего множества подобластей. После каждого такого шага пересчитываются глобальное значение интеграла и глобальная погрешность, которые представляют собой сумму значения интеграла и погрешности в каждой подобласти. Процедура интегрирования завершается при выполнении условия:

$$\begin{aligned} \text{глобальная погрешность} &\leq \text{глобальное значение интеграла} * 10^{-pg} \vee \\ &\vee \text{глобальная погрешность} \leq 10^{-ag}, \end{aligned}$$

где pg – заданная погрешность, ag – заданная точность.

Процедура также прерывается, когда количество последовательных разбиений превышает заданное число, либо когда глобальная погрешность начинает сильно колебаться. Ожидается, что глобальная погрешность должна монотонно снижаться с увеличением числа областей.

Локальная адаптивная стратегия имеет исходную и рекурсивную процедуру. Исходная процедура вычисляет погрешность в подобластях, полученных разбиением области интегрирования на первом шаге. Рекурсивная процедура вычисляет значение интеграла и погрешность в каждой подобласти, используя заданное правило интегрирования. Если погрешность в подобластях значительно больше, чем исходная погрешность, принимается решение о продолжении рекурсивной процедуры, но только для данной подобласти. Погрешность для каждой из начальных подобластей

определяется как сумма погрешностей, получаемых при реализации рекурсивной процедуры в данной подобласти.

При рекурсивной процедуре решение о продолжении разбиения подобласти принимается только на основе значения интеграла и погрешности для данной подобласти, поэтому стратегия называется локальной. Рекурсивная процедура останавливается, если достигнуто максимальное количество шагов разбиения, либо если погрешность интеграла в подобласти незначительна.

Главные отличия глобальной и локальной адаптивных стратегий:

- критерий остановки процедуры интегрирования для глобальной стратегии – когда сумма погрешностей для всех подобластей удовлетворяет заданной точности, в то время как при локальной стратегии процедура интегрирования завершается, когда погрешность в каждой подобласти мала, по сравнению с погрешностью интеграла;
- глобальная стратегия продолжает разбиение в регионе с наибольшей погрешностью, в то время как локальная стратегия разбивает каждую подобласть, в которой погрешность недостаточно мала.

Для вычисления интегралов в выражениях для статистических характеристик, содержащих вторую производную функции Грина, применялась глобальная адаптивная стратегия. Она предполагает, что из всех субдоменов исходного интеграционного домена выбирается и разбивается на две части субрегион с наивысшей оценкой погрешности. Затем для каждой половины рассчитываются значения оценки интеграла и оценки погрешности, и эта процедура повторяется для всего набора субдоменов. Оценка интегральной погрешности производится с использованием взвешенной суммы $\sum w_i f(x_i)$ для каждой точки x_i и весового коэффициента w_i . После бисекции региона и последующей интеграции по новым субрегионам рассчитываются новые глобальные оценки интеграла и глобальной

погрешности, которые представляют собой суммы оценок интеграла и погрешности по всем регионам. Предполагается, что глобальная ошибка должна уменьшаться монотонно [340].

Многомерное правило интегрирования определяется следующим образом [341]. Для куба $[-0.5, 0.5]^d$, $d \in \mathbb{N}$, $d > 1$, задается множество точек, в котором любая точка может быть получена путем перемещения или замены знака координат любой другой точки этого же множества. Все точки множества имеют одинаковый весовой коэффициент. Если K таких множеств определены, а i -е множество Ω_i имеет весовой коэффициент w_i , то интегральное значение может быть аппроксимировано как:

$$\int_{[-0.5, 0.5]^d} f(X) dX \approx \sum_{i=1}^K w_i \sum_{X_j \in \Omega_i} f(X_j). \quad (2.34)$$

Один из основных вопросов в практической реализации вычислительных методов на основе производных функций Грина связан с вопросом определения области сингулярности V_0 . Для обработки сингулярности может быть применено преобразование переменной ИМТ, предложенное в системе Wolfram Mathematica в качестве стандартного механизма обработки сингулярности. Это преобразование переменной в квадратурном методе, который предложен Ири, Моригути и Такасой [342–344], и основывается на идее преобразования независимой переменной таким образом, что все производные нового подынтегрального выражения исчезают в конечных точках интервала интегрирования $\varphi_{q,s}(t): a, b \rightarrow 0, 1$:

$$\varphi_{q,s}(t) = \text{Exp} \left[q \left(1 - \frac{1}{t^s} \right) \right]. \quad (2.35)$$

Здесь $q > 0$, $s > 0$ параметры настройки, a, b границы текущего региона интеграции. График функции преобразования (2.35) представлен на рисунке 2.2 с параметрами $q = 2$, $s = 1$.

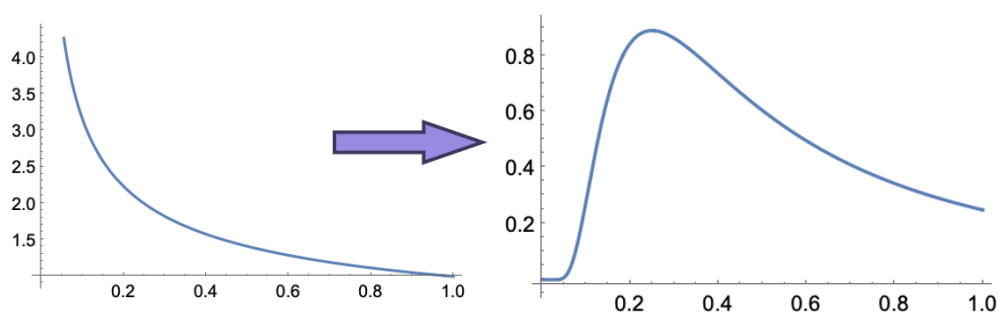


Рисунок 2.2 – Функция преобразования ИМТ для обработки сингулярности.
Сингулярность в начале оси подавляется

Преобразование ИМТ позволяет выделить область сингулярности функции Грина при прямом численном интегрировании решения стохастической краевой задачи. В зависимости от типа входных корреляционных функций интегрирование может осуществляться как в декартовых, так и в сферических координатах.

Были разработаны новые автоматизированные алгоритмы в Wolfram Mathematica, что позволяет выполнять полный цикл необходимых вычислений для предложенной методологии, от синтеза структур и построения моментных функций для них, до расчета статистических характеристик полей напряжений и деформаций в различных фазах композитов [173]. Примененные методы параллельных вычислений значительно сократили время вычислений.

Представленные в главе результаты опубликованы в работах [113, 114, 118, 134].

ГЛАВА 3. Взаимосвязь морфологических и механических статистических характеристик

Статистические моменты локальных полей напряжений и деформаций в представительном объеме могут быть определены на основе различных методов, применяемых в механике композитов и неоднородных сред. Первый и наиболее распространенный способ состоит в создании конечно-элементной модели и обработки расчетных данных в дискретных элементах, принадлежащих матрице или включениям. В данном случае результат зависит от разбивки сетки, плотность которой возрастает вместе со сложностью геометрии модели. Восстановление закона распределения напряжений в представительном объеме и его фазах может быть выполнено при помощи следующей процедуры. Для каждого компонента тензора напряжений, полученного для конечных элементов, соответствующих каждой фазе, строится выборка пар значений напряжений и соответствующей вероятности (веса коэффициента). В качестве инструмента анализа полученной выборки используются моменты случайной величины либо процедура максимизации логарифмической функции правдоподобия [345].

Также, статистические моменты могут быть получены из решения приведенных выше стохастических краевых задач с кусочно-постоянными коэффициентами [1, 67, 72, 346]. Данный подход основан на формализации информации о микроструктуре при помощи моментных функций и решении интегрально-дифференциального уравнения, содержащего функцию Грина, для получения значений отклонения полей перемещений, деформаций и напряжений от их усредненных величин. Ниже приведены основные выкладки для вывода выражений для моментов напряжений и деформаций на основе решения стохастических краевых задач.

3.1. Многоточечное интегральное разложение для статистических моментов полей напряжений и деформаций

Поскольку микроструктурные поля в пределах представительного объема зависят от радиус-вектора и могут рассматриваться как случайные величины, для их численного количественного определения можно использовать классические инструменты статистического анализа. В частности, с помощью решения стохастической краевой задачи можно однозначно вывести выражения для центральных моментов случайных значений напряжений и деформаций. Дальнейшие аналитические выкладки будут представлены для локального случайного поля деформаций. Аналогичные шаги можно выполнить для получения выражений для поля напряжений.

С помощью индикаторной функции (2.9) поле напряжений в представительном объеме может быть выражено следующим образом:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \lambda(\vec{r})\varepsilon_I(\vec{r}) + (1 - \lambda(\vec{r}))\varepsilon_M(\vec{r}). \quad (3.1)$$

Умножая это выражение на $\lambda(\vec{r})$ и принимая во внимание, что по определению $\lambda(\vec{r})\lambda(\vec{r}) = \lambda(\vec{r})$ и $\lambda(\vec{r})(1 - \lambda(\vec{r})) = 0$ имеем:

$$\lambda(\vec{r})\varepsilon(\vec{r}) = \lambda(\vec{r})\varepsilon_I(\vec{r}). \quad (3.2)$$

Применяя оператор усреднения и принимая во внимание разложение с учетом метода флуктуаций:

$$\langle (p + \lambda'(\vec{r}))(\langle \varepsilon(\vec{r}) \rangle + \varepsilon'(\vec{r})) \rangle = p\langle \varepsilon \rangle_I. \quad (3.3)$$

Последнее, учитывая, что $\langle \lambda'(\vec{r}) \rangle = \langle \varepsilon'(\vec{r}) \rangle = 0$ и $\langle \varepsilon(\vec{r}) \rangle = \mathbf{e}$ приводит к следующему:

$$p\mathbf{e} + \langle \lambda'(\vec{r})\varepsilon'(\vec{r}) \rangle = p\langle \varepsilon_I' \rangle. \quad (3.4)$$

Объединяя слагаемые, можно выразить средние значения деформаций в фазе включений как:

$$\langle \varepsilon \rangle_I = \mathbf{e} + p^{-1} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle. \quad (3.5)$$

Аналогичное выражение можно получить для средних деформаций в фазе матрицы, умножив уравнение (3.1) на $(1 - \lambda(\vec{r}))$ вместо $\lambda(\vec{r})$, и повторив процедуру:

$$\langle \varepsilon \rangle_M = \mathbf{e} - (1 - p)^{-1} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle. \quad (3.6)$$

Та же самая процедура для поля напряжений дает:

$$\langle \sigma \rangle_I = \langle \sigma \rangle + p^{-1} \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle, \quad (3.7)$$

$$\langle \sigma \rangle_M = \langle \sigma \rangle - (1 - p)^{-1} \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle. \quad (3.8)$$

Для получения момента второго порядка выражение (3.2) должно быть возведено в квадрат [72]:

$$\lambda(\vec{r}) \varepsilon^2(\vec{r}) = p \varepsilon_I^2(\vec{r}). \quad (3.9)$$

После этого вводятся флуктуационные декомпозиции:

$$\langle (p + \lambda'(\vec{r})) (\langle \varepsilon(\vec{r}) \rangle + \varepsilon'(\vec{r}))^2 \rangle = p \left(\langle \varepsilon(\vec{r}) \rangle_I^2 + \langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle_I \right). \quad (3.10)$$

Раскрывая последнее уравнение, можно выразить центральные моменты второго порядка как:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle_I &= \langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle + \mathbf{e} \mathbf{e} - \langle \varepsilon \rangle_I \langle \varepsilon \rangle_I + \\ &+ p^{-1} (\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle + \mathbf{e} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle + \mathbf{e} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle), \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle_M &= \langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle + \mathbf{e} \mathbf{e} - \langle \varepsilon \rangle_M \langle \varepsilon \rangle_M - \\ &- (1 - p)^{-1} (\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle + \mathbf{e} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle + \mathbf{e} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle), \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle_I &= \langle \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle + \langle \sigma \rangle \langle \sigma \rangle - \langle \sigma \rangle_I \langle \sigma \rangle_I + \\ &+ p^{-1} (\langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle + \langle \sigma \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle + \langle \sigma \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle), \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned}
\langle \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle_M &= \langle \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle + \langle \sigma \rangle \langle \sigma \rangle - \langle \sigma \rangle_M \langle \sigma \rangle_M - \\
&- (1-p)^{-1} (\langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle + \langle \sigma \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle + \\
&\quad \langle \sigma \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle),
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Легко показать, что выражения для моментов n -го порядка можно получить, возведя выражение (3.2) в n -ю степень.

Моменты второго порядка $\langle \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle$, $\langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle$ описывают представительный объем как однородный, в то время как моменты первого и второго порядка $\langle \varepsilon(\vec{r}) \rangle_C$, $\langle \sigma(\vec{r}) \rangle_C$, $\langle \sigma'(\vec{r}) \sigma'(\vec{r}) \rangle_C$, $\langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle_C$ характеризуют поля в компоненте C .

Аналитические выражения для моментов $\langle \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle$, $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle$ и $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \varepsilon'(\vec{r}) \rangle$ необходимы для уравнений (3.5)-(3.8) и (3.11)-(3.14).

Принимая во внимание, что $\varepsilon'_{ij}(\vec{r}) = \frac{1}{2} (u'_{i,j}(\vec{r}) + u'_{j,i}(\vec{r}))$, последовательные разложения для этих моментов могут быть представлены с помощью решения стохастической краевой задачи и структурных многоточечных моментных функций $K^{(n)}$ следующим образом (аргументы функций и индексы тензоров опускаются для краткости):

$$\langle \lambda' \varepsilon' \rangle = \frac{1}{2} (\mathbf{e} \bar{\mathbf{C}} \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G}) K^{(2)} dV + \mathbf{e} \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{C}} \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G}) \mathbf{G} K^{(3)} dV + \dots), \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned}
\langle \varepsilon' \varepsilon' \rangle &= \frac{1}{4} \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{C}} \left(\mathbf{e} \mathbf{e} \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G})(\mathbf{G} + \mathbf{G}) K^{(2)} dV \right. \\
&\quad \left. + \mathbf{e} \mathbf{e} \bar{\mathbf{C}} \int_V \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G})(\mathbf{G} + \mathbf{G}) \mathbf{G} K^{(3)} dV \right. \\
&\quad \left. + \mathbf{e} \mathbf{e} \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{C}} \int_V \int_V \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G})(\mathbf{G} + \mathbf{G}) \mathbf{G} \mathbf{G} K^{(4)} dV + \dots \right),
\end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\begin{aligned}
\langle \lambda' \varepsilon' \varepsilon' \rangle = & \frac{1}{4} \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{C}} \left(\mathbf{e} \mathbf{e} \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G})(\mathbf{G} + \mathbf{G}) K^{(3)} dV \right. \\
& + \mathbf{e} \mathbf{e} \bar{\mathbf{C}} \int_V \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G})(\mathbf{G} + \mathbf{G}) \mathbf{G} K^{(4)} dV \\
& \left. + \mathbf{e} \mathbf{e} \bar{\mathbf{C}} \bar{\mathbf{C}} \int_V \int_V \int_V \int_V (\mathbf{G} + \mathbf{G})(\mathbf{G} + \mathbf{G}) \mathbf{G} \mathbf{G} K^{(5)} dV + \dots \right), \quad (3.17)
\end{aligned}$$

Точность этих статистических характеристик можно повысить, если учитывать члены со структурными моментными функциями более высокого порядка. Моменты, содержащие флуктуации напряжений, можно выразить через моменты, содержащие флуктуации деформаций:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle & = e_{kl} e_{\phi h} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} D_{\lambda}^{(2)} + e_{kl} \bar{C}_{ijkl} \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \\
& + e_{\phi h} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
& + \langle C_{ijkl} \rangle \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
& - e_{kl} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} (1 - 2p) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \\
& - e_{\phi h} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} (1 - 2p) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
& - \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
& - \bar{C}_{ijkl} \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
& + \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \left((1 - 2p) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \right. \\
& \left. + D_{\lambda}^{(2)} \langle \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \right), \quad (3.18)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle & = e_{kl} \bar{C}_{ijkl} D_{\lambda}^{(2)} - \bar{C}_{ijkl} (1 - 2p) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
& + \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle, \quad (3.19)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle \\
&= e_{kl} e_{\phi h} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} D_{\lambda}^{(3)} \\
&+ e_{kl} \bar{C}_{ijkl} (1 - 2p) \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \\
&+ e_{\phi h} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} (1 - 2p) \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
&+ \langle C_{ijkl} \rangle \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
&- e_{kl} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \left(1 - 3D_{\lambda}^{(2)} \right) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \\
&- e_{\phi h} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \left(1 - 3D_{\lambda}^{(2)} \right) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\
&- \left(\bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle C_{ijkl} \rangle \right. \\
&+ \left. \bar{C}_{ijkl} \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \right) \left((1 - 2p) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \right. \\
&+ \left. D_{\lambda}^{(2)} \langle \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \right) \\
&+ \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \left(\left(1 - 3D_{\lambda}^{(2)} \right) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \right. \\
&+ \left. D_{\lambda}^{(3)} \langle \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle \right). \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Здесь тензор $\bar{C}_{ijkl} = C_{ijkl}^I - C_{ijkl}^M$ представляет собой разницу тензоров модулей упругости включений и матрицы.

Приходим к тому, что для вычисления моментов полей деформаций и напряжений второго порядка необходимо знать аналитический вид лишь безусловного момента $\langle \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \rangle$, а также смешанных безусловных моментов $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle$ и $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle$.

Все безусловные моменты, необходимые для вычисления статистических характеристик структурных полей деформирования, зависят только от геометрии структуры, ее физических свойств и условий нагружения. Физические свойства компонентов структуры определяются тензорами модулей упругости включений и матрицы C_{ijkl}^I , C_{ijkl}^M . Геометрия структуры

характеризуется объемной долей p , центральными моментами $D_\lambda^{(n)}$ индикаторной функции, а также многоточечными моментными функциями высших порядков.

Полученные аналитические выражения для статистических моментов могут быть использованы для численной реконструкции функций распределения для локальных полей напряжений и деформаций.

Запишем моменты $\langle \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{ph}(\vec{r}) \rangle$, $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle$, $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{ph}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle$ во вторых производных функции Грина. Интегралы, содержащие функции Грина и моментные функции, будем сокращенно записывать так, как показано ниже:

$$I_{1,2,11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} = D_\lambda^{(5)} \int_{V_1} \int_{V_2} \int_{V_{11}} \int_{V_{21}} \left(G_{im,jn}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{jm,in}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \left(G_{\alpha\gamma,\beta\eta}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_2) + G_{\beta\gamma,\alpha\eta}^{(f)}(\vec{r}, \vec{r}_2) \right) \times G_{kf,ls}^{(f)}(\vec{r}_x, \vec{r}_{11}) G_{\phi v,hw}^{(f)}(\vec{r}_x, \vec{r}_{21}) f_\lambda^{(5)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21}) dV_{21} dV_{11} dV_2 dV_1, \quad (3.21)$$

где нижние индексы в скобках обозначают наличие в интеграле соответствующих множителей, содержащих функцию Грина, верхние индексы определяют порядок и аргумент моментной функции. Индекс x радиус-вектора однозначно определяется подынтегральными множителями и правилами свертки Дирака. Кратность интеграла определяется количеством независимых переменных $\vec{r}$. Отсутствие переменных $\vec{r}$ в скобках означает, что в подынтегральном выражении нет моментной функции.

Тогда, во втором приближении решения задачи смешанные моменты расписываются в следующем виде:

$$\langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{4} (A_1 + 2A_2 + A_4), \quad (3.22)$$

$$\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \rangle = \frac{1}{2} (B_1 + B_2), \quad (3.23)$$

$$\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle^{(2)} = \frac{1}{4} (C_1 + 2C_2 + C_4). \quad (3.24)$$

Слагаемые A_2 , A_4 , B_2 , C_2 , C_4 в этих выражениях являются добавкой, вносимой вторым приближением, и уточняющей решение в первом приближении. С учетом использования второй производной функции Грина и разложения на сингулярную и формальную составляющие, слагаемые искомым моментов имеют следующий вид:

$$A_1 = \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} e_{kl} e_{\phi h} \left(I_{1,2}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} + (g_{ijmn} + g_{jmin}) I_2^{(\vec{r}, \vec{r}_2)} + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) I_1^{(\vec{r}, \vec{r}_1)} + (g_{ijmn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) D_\lambda^{(2)} \right), \quad (3.25)$$

$$A_2 = e_{kl} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{vwbd} \left(I_{1,2,21}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + (g_{imjn} + g_{jmin}) I_{2,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) I_{1,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{21})} + g_{\phi vhw} I_{1,2}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)} + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{\phi vhw} (1 - 2p) I_1^{(\vec{r}, \vec{r}_1)} + (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{\phi vhw} (1 - 2p) I_2^{(\vec{r}, \vec{r}_2)} + (g_{imjn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) (1 - 2p) I_{21}^{(\vec{r}, \vec{r}_{21})} + (g_{imjn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{g vhw} D_\lambda^{(3)} \right), \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned}
A_4 = e_{oq} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{fsoq} \bar{C}_{vwbd} \Bigg(& (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} g_{\phi vhw} D_\lambda^{(4)} + (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} (1 - \\
& 3D_\lambda^{(2)}) I_{21}^{(\vec{r}, \vec{r}_{21})} + (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{kfls} g_{\phi vhw} (1 - 3D_\lambda^{(2)}) I_2^{(\vec{r}, \vec{r}_2)} + \\
& (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} g_{\phi vhw} (1 - 3D_\lambda^{(2)}) I_1^{(\vec{r}, \vec{r}_1)} + (g_{imjn} + \\
& g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) \left[(1 - 2p) I_{11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(2)} I_{11,21}^{(\vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} \right] + \\
& (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{kfls} \left[(1 - 2p) I_{2,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(2)} I_{2,21}^{(\vec{r}_2, \vec{r}_{21})} \right] + (g_{imjn} + \\
& g_{jmin}) g_{\phi vhw} \left[(1 - 2p) I_{2,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{11})} + D_\lambda^{(2)} I_{2,11}^{(\vec{r}_2, \vec{r}_{11})} \right] + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} \left[(1 - 2p) I_{1,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(2)} I_{1,21}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_{21})} \right] + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{\phi vhw} \left[(1 - 2p) I_{1,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{11})} + D_\lambda^{(2)} I_{1,11}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_{11})} \right] + g_{kfls} g_{\phi vhw} \left[(1 - \right. \\
& \left. 2p) I_{1,2}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)} + D_\lambda^{(2)} I_{1,2}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} \right] + (g_{imjn} + g_{jmin}) I_{2,11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) I_{1,11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + g_{kfls} I_{1,2,21}^{(\vec{r}, \vec{H}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + g_{\phi vhw} I_{1,2,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11})} + I_{1,2,11,21}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} \Bigg), \tag{3.27}
\end{aligned}$$

$$B_1 = e_{kl} \bar{C}_{mnkl} \left[(g_{imjn} + g_{jmin}) D_\lambda^{(2)} + I_1^{(\vec{r}, \vec{r}_1)} \right], \tag{3.28}$$

$$\begin{aligned}
B_2 = e_{oq} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{fsoq} \Bigg(& (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{kfls} D_\lambda^{(3)} + (g_{imjn} + g_{jmin}) (1 - \\
& 2p) I_{11}^{(\vec{r}, \vec{r}_{11})} + g_{kfls} (1 - 2p) I_1^{(\vec{r}, \vec{r}_1)} + I_{1,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{11})} \Bigg), \tag{3.29}
\end{aligned}$$

$$C_1 = e_{kl}e_{\phi h}\bar{C}_{mnkl}\bar{C}_{\gamma\eta\phi h}\left(I_{1,2}^{(\vec{r},\vec{r}_1,\vec{r}_2)} + (g_{imjn} + g_{jmin})(1-2p)I_2^{(\vec{r},\vec{r}_2)} + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta})(1-2p)I_1^{(\vec{r},\vec{r}_1)} + (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta})D_\lambda^{(2)}\right), \quad (3.30)$$

$$C_2$$

$$\begin{aligned} &= e_{kl}e_{bd}\bar{C}_{mnkl}\bar{C}_{\gamma\eta\phi h}\bar{C}_{vwbd}\left((g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta})g_{\phi vhw}D_\lambda^{(4)}\right. \\ &+ (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta})\left(1 - 3D_\lambda^{(2)}\right)I_{21}^{(\vec{r},\vec{r}_{21})} \\ &+ (g_{imjn} + g_{jmin})g_{\phi vhw}\left(1 - 3D_\lambda^{(2)}\right)I_2^{(\vec{r},\vec{r}_2)} \\ &+ (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta})g_{\phi vhw}\left(1 - 3D_\lambda^{(2)}\right)I_1^{(\vec{r},\vec{r}_1)} \\ &+ (g_{imjn} + g_{jmin})\left[(1-2p)I_{2,21}^{(\vec{r},\vec{r}_2,\vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(2)}I_{2,21}^{(\vec{r}_2,\vec{r}_{21})}\right] \\ &+ (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta})\left[(1-2p)I_{1,21}^{(\vec{r},\vec{r}_1,\vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(2)}I_{1,21}^{(\vec{r}_1,\vec{r}_{21})}\right] \\ &\left.+ g_{\phi vhw}\left[(1-2e)I_{1,2}^{(\vec{r},\vec{r}_1,\vec{r}_2)} + D_\lambda^{(2)}I_{1,2}^{(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}\right] + I_{1,2,21}^{(\vec{r},\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_{21})}\right), \quad (3.31) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_4 = e_{oq} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{fsoq} \bar{C}_{vwbd} & \left((g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \right. \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} g_{\phi vhw} D_\lambda^{(5)} + (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} (p^{-1} D_\lambda^{(4)} - \\
& p^3) I_{21}^{(\vec{r}, \vec{r}_{21})} + (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{\phi vhw} (p^{-1} D_\lambda^{(4)} - p^3) I_{11}^{(\vec{r}, \vec{r}_{11})} + \\
& (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{kfls} g_{\phi vhw} (p^{-1} D_\lambda^{(4)} - p^3) I_2^{(\vec{r}, \vec{r}_2)} + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} g_{\phi vhw} (p^{-1} D_\lambda^{(4)} - p^3) I_1^{(\vec{r}, \vec{r}_1)} + (g_{imjn} + g_{jmin})(g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) \left[(1 - \right. \\
& 3D_\lambda^{(2)}) I_{11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(3)} I_{11,21}^{(\vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} \left. \right] + (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{kfls} \left[(1 - 3D_\lambda^{(2)}) I_{2,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + \right. \\
& D_\lambda^{(3)} I_{2,21}^{(\vec{r}_2, \vec{r}_{21})} \left. \right] + (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{\phi vhw} \left[(1 - 3D_\lambda^{(2)}) I_{2,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{11})} + D_\lambda^{(3)} I_{2,11}^{(\vec{r}_2, \vec{r}_{11})} \right] + \\
& (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} \left[(1 - 3D_\lambda^{(2)}) I_{1,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(3)} I_{1,21}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_{21})} \right] + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{\phi vhw} \left[(1 - 3D_\lambda^{(2)}) I_{1,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{11})} + D_\lambda^{(3)} I_{1,11}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_{11})} \right] + g_{kfls} g_{\phi vhw} \left[(1 - \right. \\
& 3D_\lambda^{(2)}) I_{1,2}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)} + D_\lambda^{(3)} I_{1,2}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2)} \left. \right] + (g_{imjn} + g_{jmin}) \left[(1 - 2p) I_{2,11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + \right. \\
& D_\lambda^{(2)} I_{2,11,21}^{(\vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + p^3 D_\lambda^{(2)} I_{2,11,21} \left. \right] + (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) \left[(1 - 2p) I_{1,11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + \right. \\
& D_\lambda^{(2)} I_{1,11,21}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} + p^3 D_\lambda^{(2)} I_{1,11,21} \left. \right] + g_{kfls} \left[(1 - 2p) I_{1,2,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + D_\lambda^{(2)} I_{1,2,21}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{21})} + \right. \\
& p^3 D_\lambda^{(2)} I_{1,2,21} \left. \right] + g_{\phi vhw} \left[(1 - 2p) I_{1,2,11}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11})} + D_\lambda^{(2)} I_{1,2,11}^{(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11})} + p^3 D_\lambda^{(2)} I_{1,2,11} \right] + \\
& \left. I_{1,2,11,21}^{(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_{11}, \vec{r}_{21})} \right). \tag{3.32}
\end{aligned}$$

Полученные выражения содержат в явном виде структурные моментные функции до 5-го порядка и представляют собой более общий случай выражений для статистических характеристик полей.

Исключая из последних выражений все слагаемые, содержащие формальную составляющую, получаем сингулярное приближение для статистических характеристик, подобно тому, как это сделано в [67]. Из-за отсутствия слагаемых, содержащих корреляционные функции, сингулярное приближение не учитывает реального распределения компонент в представительном объеме, а зависит только лишь от объемной доли.

$$\begin{aligned}
\langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle = & \frac{1}{4} \left(\bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} e_{kl} e_{\phi h} (g_{ijmn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \right. \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) D_{\lambda}^{(2)} + 2e_{kl} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{vwbd} (g_{imjn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{gvhw} D_{\lambda}^{(3)} + e_{oq} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{fsoq} \bar{C}_{vwbd} (g_{imjn} + \\
& \left. g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} g_{\phi vhw} D_{\lambda}^{(4)} \right),
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \rangle = & \frac{1}{2} \left(e_{kl} \bar{C}_{mnkl} (g_{imjn} + g_{jmin}) D_{\lambda}^2 + \right. \\
& \left. e_{oq} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{fsoq} (g_{imjn} + g_{jmin}) g_{kfls} D_{\lambda}^{(3)} \right),
\end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle = & \frac{1}{4} \left(e_{kl} e_{\phi h} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} (g_{imjn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) D_{\lambda}^{(2)} \right. \\
& + 2e_{kl} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{vwbd} (g_{imjn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{\phi vhw} D_{\lambda}^{(4)} \\
& + e_{oq} e_{bd} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \bar{C}_{fsoq} \bar{C}_{vwbd} (g_{imjn} + g_{jmin}) (g_{\alpha\gamma\beta\eta} + \\
& \left. + g_{\beta\gamma\alpha\eta}) g_{kfls} g_{\phi vhw} D_{\lambda}^{(5)} \right).
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Очевидно, что вклад, вносимый вторым приближением решения задачи, существенен в плане усложнения аналитических выражений, однако, содержит слагаемые, которые не зависят от моментных функций и которыми можно пренебречь при численном интегрировании в силу незначительности их вклада в значения моментов.

Численный расчет полученных выражений может быть значительно упрощен при задании конкретных видов нагружения за счет свойств симметрии входящих в выражения тензоров. Вычисление значений многомерных интегралов, входящих в выражения, может быть произведен в коммерческих пакетах (например, Wolfram Mathematica), которые предлагают большой набор схем интегрирования. Выделение сингулярности позволяет

производить интегрирование без дополнительного анализа подынтегральных выражений, что значительно увеличивает скорость вычислений. Выражения легко поддаются реализации с использованием параллельных вычислений.

Таким образом, задавая упругие характеристики компонентов композита, напряженно-деформированное состояние (с помощью тензора макродеформаций), имея аналитические выражения для структурных моментных функций, можно с помощью методов численного интегрирования вычислить моменты полей структурных деформаций и напряжений с необходимой точностью учета морфологии посредством многоточечных моментных функций высокого порядка.

Приведенные в разделе результаты опубликованы в статье [116].

3.2. Статистическое описание деформирования многокомпонентных композитов

В общем случае многокомпонентного материала вводится индикаторная функция $\lambda_C(\vec{r})$, которая принимает значение 1, если радиус-вектор $\vec{r}$ находится в компоненте C, и равна 0 во всех остальных случаях. Тензор модулей упругости для представительного объема является статистически однородным и определяется как сумма произведений тензора $C_{ijkl}^{(z)}$ и соответствующих индикаторных функций $\lambda_C(\vec{r})$ для каждого компонента. В результате он принимает форму кусочно-постоянной функции координат:

$$C_{ijkl}(\vec{r}) = \sum_{z=1}^n \lambda_C(\vec{r}) C_{ijkl}^{(z)}. \quad (3.36)$$

Усреднение уравнения (3.36) дает постоянный изотропный тензор, который зависит от объемных долей фаз:

$$\langle C_{ijkl}(\vec{r}) \rangle = \sum_{z=1}^n p_{(z)} C_{ijkl}^{(z)}, \quad (3.37)$$

где $p_{(z)} = \langle \lambda_{(z)}(\vec{r}) \rangle$ объемная доля фазы z .

Для флуктуации случайной индикаторной функции, выражение для корреляционной функции можно записать в виде:

$$\begin{aligned} K_{\lambda_c}^{(n)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) &= \langle \lambda'_c(\vec{r}_1) \lambda'_c(\vec{r}_2) \dots \lambda'_c(\vec{r}_n) \rangle \\ &= \langle (\lambda_c(\vec{r}_1) - p_c)(\lambda_c(\vec{r}_2) - p_c) \dots (\lambda_c(\vec{r}_n) - p_c) \rangle. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Ниже приведен пример применения методологии для частного случае дисперсно армированных многокомпонентных сред. Микроструктурные составляющие представительного объема среды были смоделированы как случайно расположенные сферы различных размеров. Были рассмотрены три фазы в представительном объеме: металлическая матрица, армирующие частицы и поры, в разных пропорциях. Такие модели соответствуют данным изображений, полученных из микроструктурных экспериментов для композитов с металлической матрицей, например, в работах [347, 348]. Геометрические свойства моделируемых представительных объемов отображены в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Геометрические свойства представительных объемов

Модель	Объемная доля, p		Количество включений, N	Минимальный радиус		Максимальный радиус	
	Фаза №1	Фаза №2 (поры)		Фаза №1	Фаза №2 (поры)	Фаза №1	Фаза №2 (поры)
1	10%	1%	222	8	8	8	12
2	15%	1%	327	8	8	8	12
3	20%	1%	445	8	8	8	12
4	25%	1%	603	8	8	8	12
6	10%	5%	396	8	8	8	12
7	10%	10%	600	8	8	8	12
8	10%	15%	821	8	8	8	12
9	10%	-	54	6	-	25	-
10	20%	-	133	6	-	28	-
11	30%	-	495	6	-	30	-

Первые четыре структуры в таблице 3.1 отличаются только объемной долей фазы №1. Структуры 1, 6, 7, 8 имеют одинаковую долю включений, но различные концентрации пор (от 1% до 15%). Последние три двухфазные модели имеют полидисперсную структуру с широким диапазоном размеров включений (сфер радиусов). 3D-графические изображения этих структур представлены на рисунке 3.1.

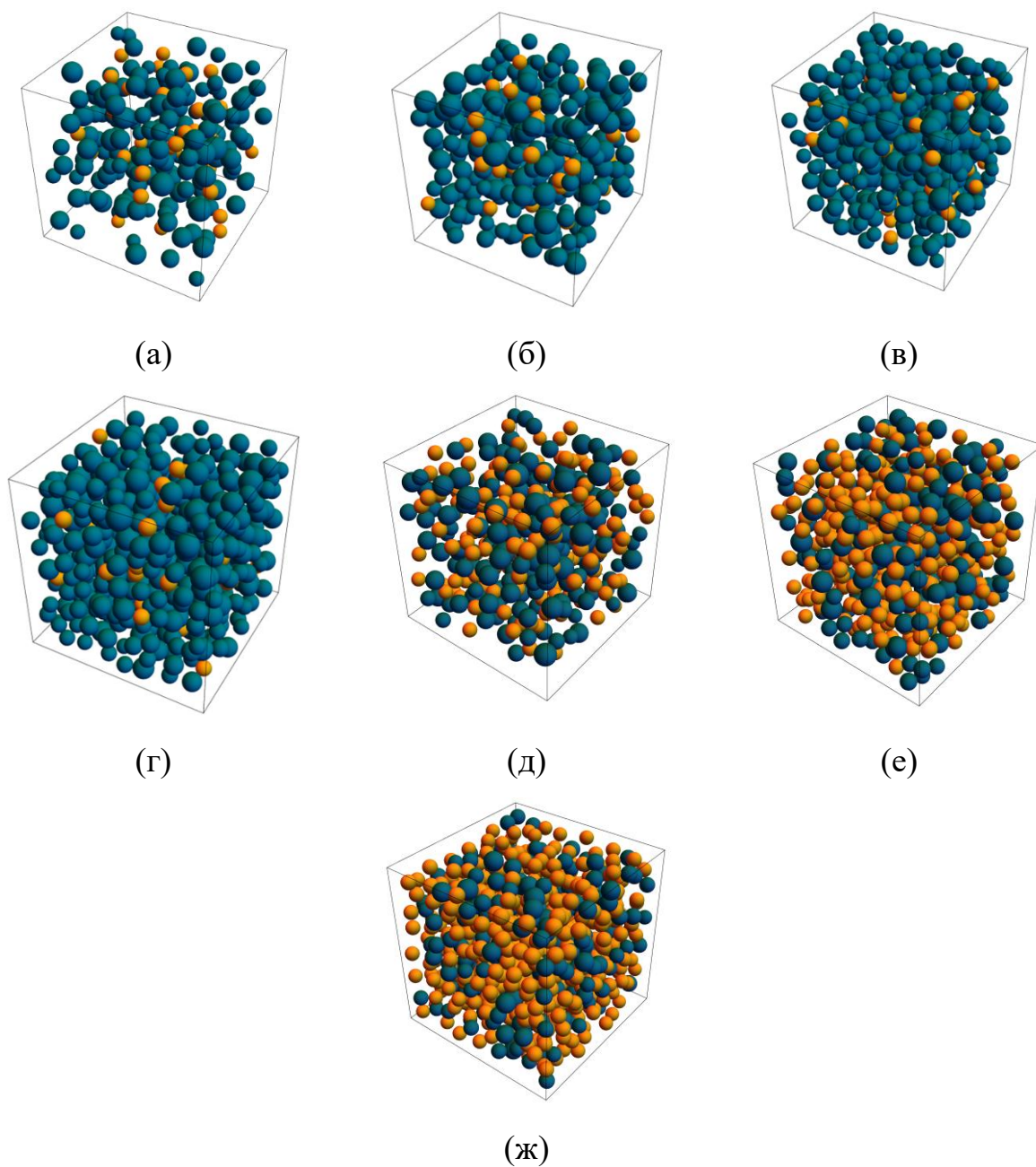


Рисунок 3.1 – Трехфазные представительные объемы с различными объемными долями фаз: (а) 10%-1%, (б) 15%-1%, (в) 20%-1%, (г) 25%-1%, (д) 10%-5%, (е) 10%-10%, (ж) 10%-15%

Механические свойства включений и матрицы для первого типа композитов приведены в таблице 3.2. Считалось, что поры были заполнены вакуумом.

Таблица 3.2. Механические свойства фаз для случая двухфазных
КОМПОЗИТОВ

	Включения	Матрица
Упругий модуль	$E_c = 410$ ГПа	$E_M = 70$ ГПа
Коэффициент Пуассона	$\nu_c = 0.14$	$\nu_M = 0.35$

Нагружение представительного объема соответствовала простому сдвигу, и была определена путем задания компонентов макромасштабного тензора деформаций e_{ij} :

$$e = \begin{pmatrix} 0 & 10^{-6} & 0 \\ 10^{-6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Графики моментных функций второго и третьего порядка для фазы #1 представлены на рисунках 3.2 и 3.3.

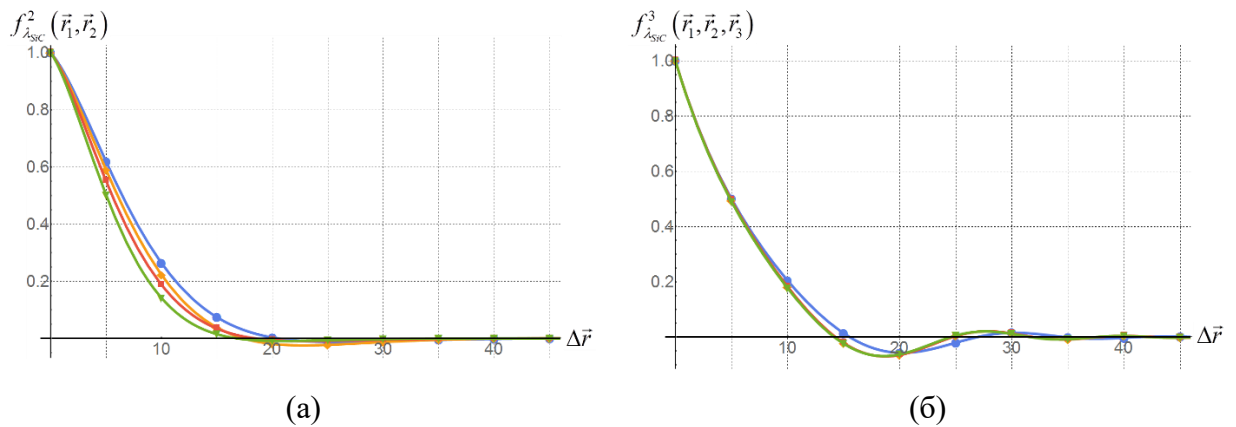


Рисунок 3.2 – Моментные функций второго (а) и третьего (б) порядка для фазы №1 двухфазных представительных объемов: —●— структура 1 (10% доля фазы №1), —◆— структура 2 (15% доля фазы №1), —■— структура 3 (20% доля фазы №1), —▽— структура 4 (25% доля фазы №1)

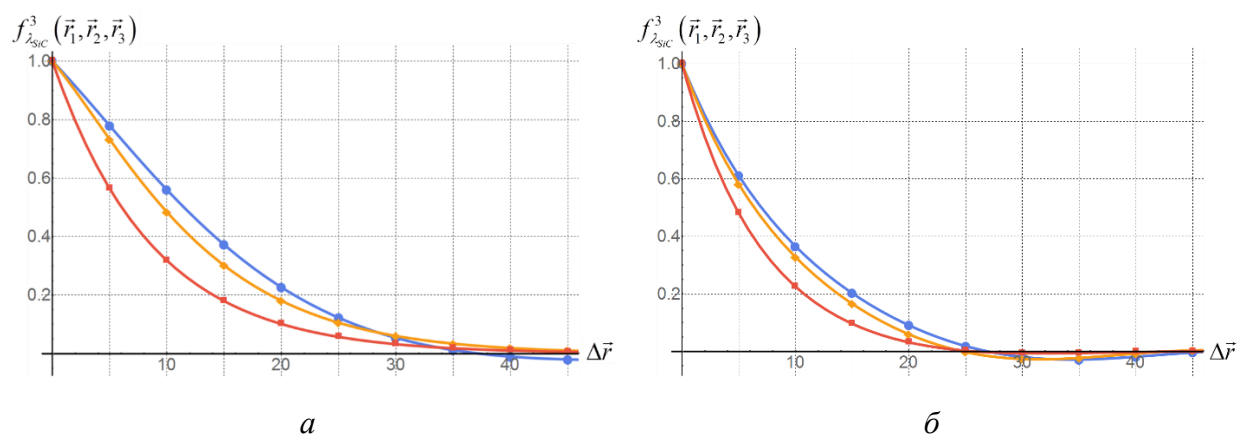


Рисунок 3.3 – Моментные функций второго (а) и третьего (б) порядка для фазы №1 двухфазных представительных объемов: —●— структура 8 (10% доля фазы №1), —◆— структура 9 (20% доля фазы №1), —■— структура 10 (30% доля фазы №1)

Полученные графики позволяют сделать некоторые замечания по их зависимости от параметров случайной структурой. Графики моментных функций для структур с постоянным размером частиц фазы #1 находятся близко друг к другу, и незначительно реагируют на изменения объема включений. Функции третьего порядка для тех же структур совпадают для объемной доли 15% и выше, что подтверждает, то, что функции третьего порядка, в основном чувствительны к геометрическим параметрам частиц.

Для каждого частного случая с помощью описанного выше подхода были рассчитаны моменты первого порядка и второго порядка полей напряжений и деформаций в фазах. Рисунок 3.4 позволяет увидеть влияние микроструктурных дефектов, которые были смоделированы как поры. Нелинейные зависимости наблюдаются для статистик первого и второго порядка в сравнении с объемом фракции пор, что свидетельствует о том, что не только количество дефектов дает эффект, но и их распределение и позиционирование. Статистики для включений демонстрируют более высокие изменения, чем статистики для матрицы, что объясняется большей разницей в механических характеристиках фаз.

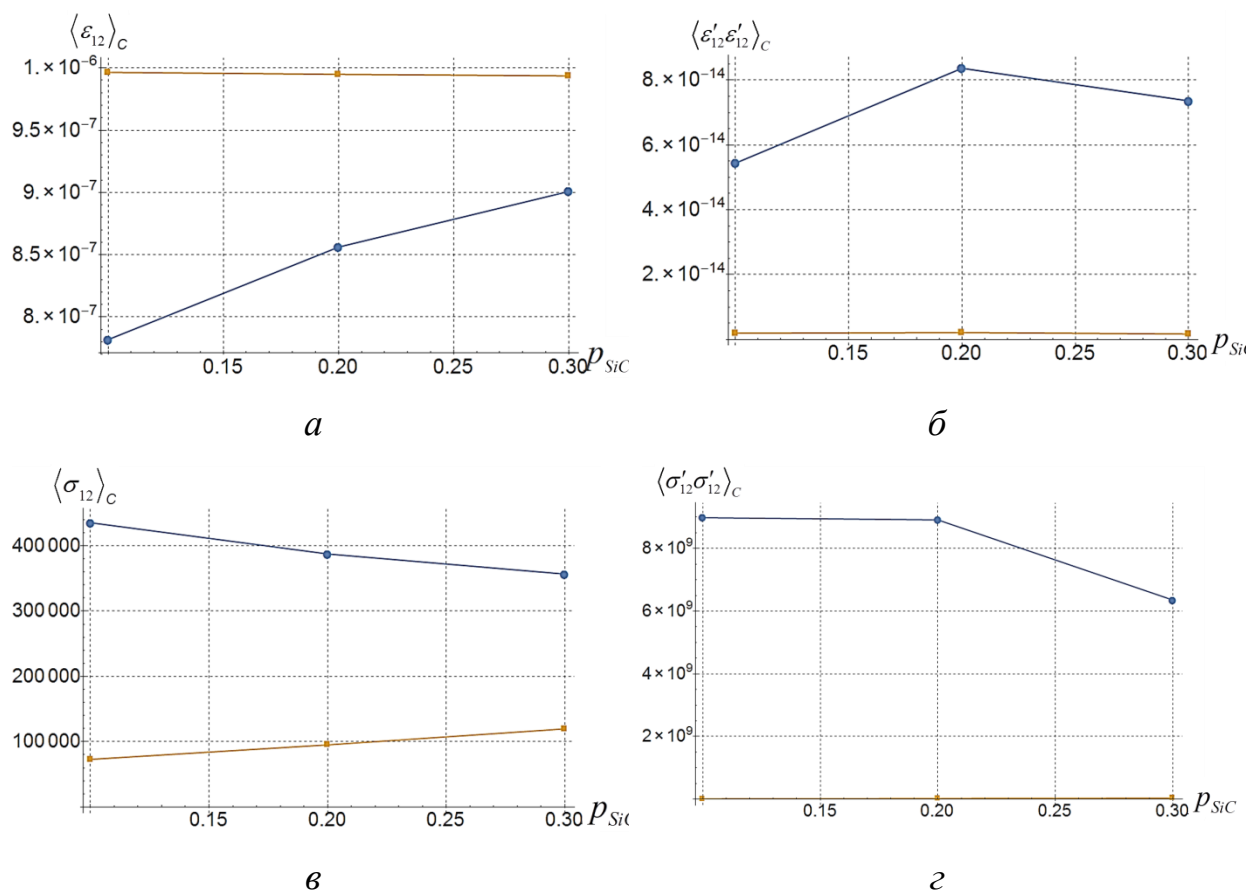


Рисунок 3.4 – Моменты первого и второго порядков для двухфазных композитов с дефектами в зависимости от объемной доли пор: —●— Включения (SiC), —■— Матрица (Ti).

Таким образом, несколько случаев двухфазных композитов с дефектами были изучены для демонстрации возможности характеристики локальных упругих полей с использованием статистик, таких как моменты первого и второго порядка полей напряжений и деформаций. Показано, что численные значения этих статистик, полученные для исследованных случаев, отражают изменения в микроструктурной конфигурации. Это позволяет изучать и оценивать влияние различных параметров микроструктуры без необходимости вычисления большого числа реализаций случайной микроструктуры представительного объема.

Представленные в данном разделе результаты опубликованы в статьях [115, 136].

3.3. Корреляционные функции полей напряжений и деформаций для компонент неоднородных сред

Выражения для многоточечных условных и безусловных моментных функций стохастических полей напряжений и деформаций в представительных объемах композитов позволяют описывать взаимосвязь полей в удаленных на различное расстояние точках, и при необходимости, вычислять значения моментов случайных полей в произвольных точках представительного объема.

В общем виде моментные функции n -го порядка полей напряжений могут быть получены из выражения:

$$M_{\sigma_C}^{(n)}(|\vec{r} - \vec{x}|) = \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} \langle \sigma \rangle^{(n-i)} \left(\frac{1}{\langle \lambda_C \rangle} \langle \lambda_C \sigma^{(i)} \rangle + D_{(i)}^{(\sigma)} \right) - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{n!}{i!(n-i)!} D_{(i)}^{(\sigma_C)} \langle \sigma \rangle_C^{(n-i)}, \quad (3.40)$$

где

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle^{(n-i)} &= \langle \sigma_{ij} \rangle \langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle \dots \langle \sigma_{xy} \rangle, \\ \langle \sigma \rangle_C^{(n-i)} &= \langle \sigma_{ij} \rangle_C \langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle_C \dots \langle \sigma_{xy} \rangle_C, \\ \langle \lambda \sigma^{(i)} \rangle &= \langle \lambda'_C(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \dots \sigma'_{xy}(\vec{r}) \rangle, \\ D_{(i)}^{(\sigma)} &= \langle \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \dots \sigma'_{xy}(\vec{r}) \rangle, \\ D_{(i)}^{(\sigma_C)} &= \langle \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \dots \sigma'_{xy}(\vec{r}) \rangle_C. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Здесь оператор $\langle \cdot \rangle$ обозначают усреднение по всему представительному объему, а $\langle \cdot \rangle_C$ обозначают усреднение по конкретной компоненте C . Принимается гипотеза, что для случайных однородных эргодических полей усреднение по объему совпадает со статистическим усреднением.

Для многокомпонентного композита в общем виде флуктуации структурных модулей упругости в i -м компоненте выражаются в следующем виде в упругом случае:

$$C'_{mnkl}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^m (\langle \lambda_i(\vec{r}) \rangle + \lambda'_i(\vec{r})) C_{mnkl}^{(i)} - \langle C_{mnkl}(\vec{r}) \rangle. \quad (3.42)$$

С учетом этой формулы и с помощью процедуры усреднения получены выражения для корреляционных функций полей напряжений, описывающего представительный объем как макрооднородный. Так, соотношение для безусловной корреляционной функции (моментной функции второго порядка) полей напряжений имеет вид:

$$\begin{aligned} M_{\sigma_c}^{(2)}(|\vec{r} - \vec{x}|) &= \langle \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle = e_{kl} e_{\phi h} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} D_2^{(\lambda)} + \\ &+ e_{kl} \bar{C}_{ijkl} \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{x}) \rangle + e_{\phi h} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle + \\ &+ \langle C_{ijkl} \rangle \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{x}) \rangle - e_{kl} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle \lambda'(\vec{r}) \lambda'(\vec{x}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{x}) \rangle - \\ &- e_{\phi h} \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle \lambda'(\vec{r}) \lambda'(\vec{x}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle - \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{x}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{x}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle \\ &- \bar{C}_{ijkl} \langle C_{\alpha\beta\phi h} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{x}) \rangle \\ &+ \bar{C}_{ijkl} \bar{C}_{\alpha\beta\phi h} \langle \lambda'(\vec{r}) \lambda'(\vec{x}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \varepsilon'_{\phi h}(\vec{x}) \rangle. \end{aligned} \quad (3.43)$$

С учетом разложения полей деформаций и напряжений на средние составляющие и флуктуации, для многокомпонентной неоднородной среды корреляционные функции полей деформаций и напряжений в компоненте C записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} M_{\varepsilon_c}^{(2)}(|\vec{r} - \vec{x}|) &= \langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle_c \\ &= \langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle + e_{ij} e_{\alpha\beta} - \langle \varepsilon_{ij} \rangle_c \langle \varepsilon_{\alpha\beta} \rangle_c + \\ &+ \frac{1}{\langle \lambda_c(\vec{r}) \rangle} (\langle \lambda'_c(\vec{r}) \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle + e_{ij} \langle \lambda'_c(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle + \\ &e_{\alpha\beta} \langle \lambda'_c(\vec{r}) \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \rangle), \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$M_{\sigma_c}^{(2)}(|\vec{r} - \vec{x}|) = \langle \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle_c \quad (3.45)$$

$$+ \frac{1}{\langle \lambda_c(\vec{r}) \rangle} (\langle \lambda'_c(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle + \langle \sigma_{ij} \rangle \langle \lambda'_c(\vec{r}) \sigma'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle + \langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle \langle \lambda'_c(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle).$$

В качестве примера далее приведены безусловные корреляционные функции полей деформаций, входящие в выражения для корреляционных функций полей напряжений и полученные с использованием первого и второго приближения решения стохастической краевой задачи в случае двухфазного композита:

$$\langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle^{(1)} = \frac{1}{4} e_{mn} e_{\nu\mu} \bar{C}_{klmn} \bar{C}_{\gamma\theta\nu\mu} \int_{V_1} \int_{V_2} (G_{ik,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{jk,i}(\vec{r}, \vec{r}_1)) (G_{\alpha\gamma,\beta}(\vec{x}, \vec{x}_1) + G_{\beta\gamma,\alpha}(\vec{x}, \vec{x}_1)) \times K_{\lambda}^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{x}_1)_{,l\theta} dV_1 dV_2, \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned} & \langle \varepsilon'_{ij}(\vec{r}) \varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x}) \rangle^{(2)} \\ &= \frac{1}{4} \bar{C}_{mnkl} \bar{C}_{\gamma\eta\phi h} \left(e_{kl} e_{\phi h} \int_{V_1} \int_{V_2} (G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{jm,i}(\vec{r}, \vec{r}_1)) (G_{\alpha\gamma,\beta}(\vec{x}, \vec{x}_1) + G_{\beta\gamma,\alpha}(\vec{x}, \vec{x}_1)) \right. \\ & \times K_{\lambda}^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{x}_1)_{,1n,1\eta} dV_2 dV_1 \\ & + e_{kl} e_{bd} \bar{C}_{vwbd} \int_{V_1} \int_{V_2} \int_{V_{21}} (G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{jm,i}(\vec{r}, \vec{r}_1)) (G_{\alpha\gamma,\beta}(\vec{x}, \vec{x}_1) + G_{\beta\gamma,\alpha}(\vec{x}, \vec{x}_1)) \\ & \times G_{\phi v,h}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) K_{\lambda}^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{x}_1, \vec{x}_2)_{,1n,1\eta,2w} dV_{21} dV_2 dV_1 \\ & + e_{\phi h} e_{oq} \bar{C}_{fsoq} \int_{V_1} \int_{V_2} \int_{V_{11}} (G_{im,j}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{jm,i}(\vec{r}, \vec{r}_1)) (G_{\alpha\gamma,\beta}(\vec{x}, \vec{x}_1) + G_{\beta\gamma,\alpha}(\vec{x}, \vec{x}_1)) \\ & \times G_{kf,l}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) K_{\lambda}^{(3)}(\vec{r}_1, \vec{x}_1, \vec{r}_2)_{,1n,1\eta,2s} dV_{11} dV_2 dV_1 \\ & \left. + e_{oq} e_{bd} \bar{C}_{fsoq} \bar{C}_{vwbd} \right). \quad (3.47) \end{aligned}$$

Таким образом, получены выражения для вычисления моментных функций первого и второго порядков полей напряжений и деформаций как для

представительного объема в целом, так и в компонентах композита с использованием структурных моментных функций высших порядков.

Для примера реализации методики были построены трехмерные модели внутренней полидисперсной структуры исследуемых материалов – двухкомпонентных матричных композитов с эллипсоидальными включениями. Предполагается, что включения расположены в матрице равномерно. Также было введено условие, согласно которому включения не могут пересекаться. Для создания геометрической модели был использован алгоритм, позволяющий синтезировать полидисперсные эллипсоидальные включения в представительном объеме заданного размера.

На рисунке 3.5 приведены изображения некоторых моделей представительных объемов с различной объемной долей эллипсоидальных включений.

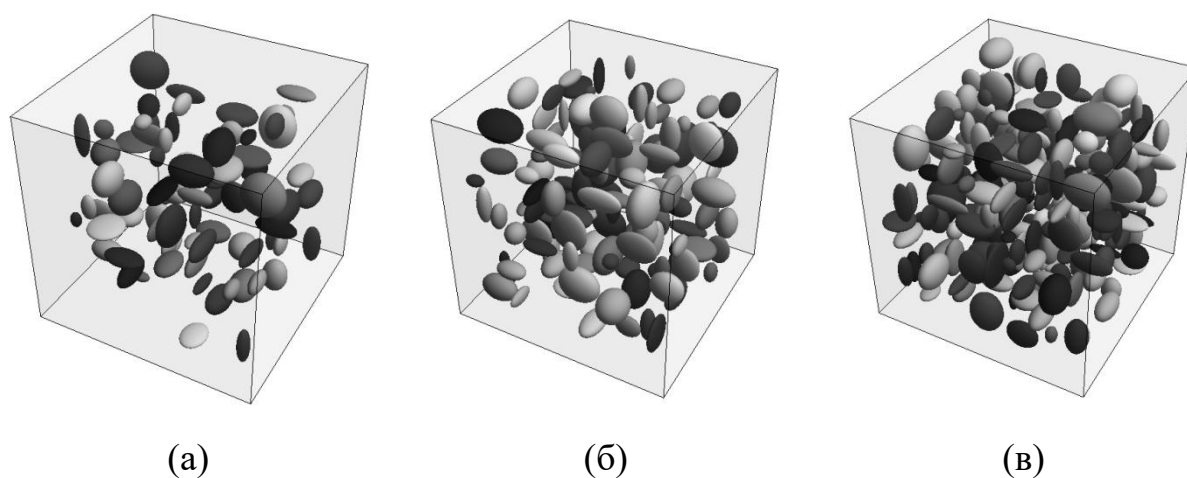


Рисунок 3.5 – Представительные объемы структур с эллипсоидальными включениями с различной объемной долей: (а) 5%, количество включений 77; (б) 10%, количество включений 158; (в) 15%, количество включений 245

Для исследуемых структур с эллипсоидальными включениями получены значения структурных моментных функций высших порядков, а также рассчитаны коэффициенты аналитических аппроксимирующих

выражений для структурных моментных функций, необходимых для вычисления моментных функций полей напряжений и деформаций. Для получения значений условных и безусловных моментных функций полей напряжений и деформаций в представительных объемах и их компонентах использовано решение стохастической упругой краевой задачи в первом приближении. В качестве входных параметров для вычислений выступают константы, характеризующие свойства компонент представительного объема, и входящие в функции Грина в подынтегральных выражениях, а также геометрические свойства компонент, определяемые структурными моментными функциями. Нагружение представительного объема задается в виде граничных условий стохастической краевой задачи.

Алгоритм численной реализации методики заключается в вычислении значений интегралов в выражениях для корреляционных функций при необходимых комбинациях индексов, в зависимости от расстояния между радиус-векторами $\vec{r}$ и $\vec{x}$. При этом значения корреляционной функции $M_{\varepsilon}^{(2)}(|\vec{r} - \vec{x}|)$ находятся путем усреднения моментов $\varepsilon'_{ij}(\vec{r})\varepsilon'_{\alpha\beta}(\vec{x})$ для заданного расстояния между радиус-векторами $|\vec{r} - \vec{x}|$, вычисленных в дискретных точках представительного объема V . Точность вычисления значений функции определяется частотой (шагом) дискретизации представительного объема.

Для реализации методик вычисления значений моментных функций полей деформирования в упругом случае при различных условиях нагружения представительных объемов и физико-механических характеристиках компонент созданы программные инструменты, реализованные в виде программного кода на языке программирования C++, а также в среде Wolfram Mathematica, с использованием возможностей параллельных вычислений [170, 171].

На приведенных ниже рисунках представлены некоторые результаты для корреляционных функций полей деформаций в представительном объеме пористого композита. Представлены дискретные значения и их интерполяция. Для расчетов был выбран частный случай деформирования – чистый сдвиг. Для упругой краевой задачи был задан тензор макродеформаций e_{ij} с ненулевыми компонентами $e_{12} = e_{21} = 10^{-6}$. Упругие свойства матрицы заданы следующими величинами: модуль упругости матрицы пористого композита $E_M = 2 \times 10^5$ МПа; коэффициент Пуассона $\nu_m = 0.3$.

На рисунке 3.6 представлена нормированная корреляционная функция полей деформаций для пористого материала со сферическими порами ($p=0,24$). Нормирование проводилось делением значений построенной корреляционной функции на дисперсию полей деформаций, то есть на значение корреляционной функции при $|\vec{r} - \vec{x}|=0$.

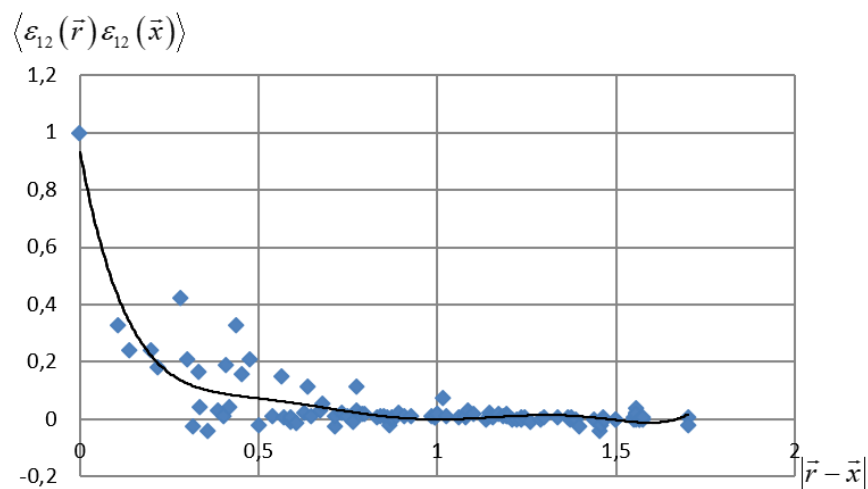


Рисунок 3.6 – Нормированная моментная функция деформации $\langle \varepsilon_{12}(\vec{r}) \varepsilon_{12}(\vec{x}) \rangle$ для структуры с объемной долей 24% при чистом сдвиге

Проведено исследование моментной функции полей деформаций для структур с эллипсоидальными порами от вариации разброса максимального размера полуоси эллипсоидальных включений (рисунок 3.7) и от объемного содержания включений (рисунок 3.8).

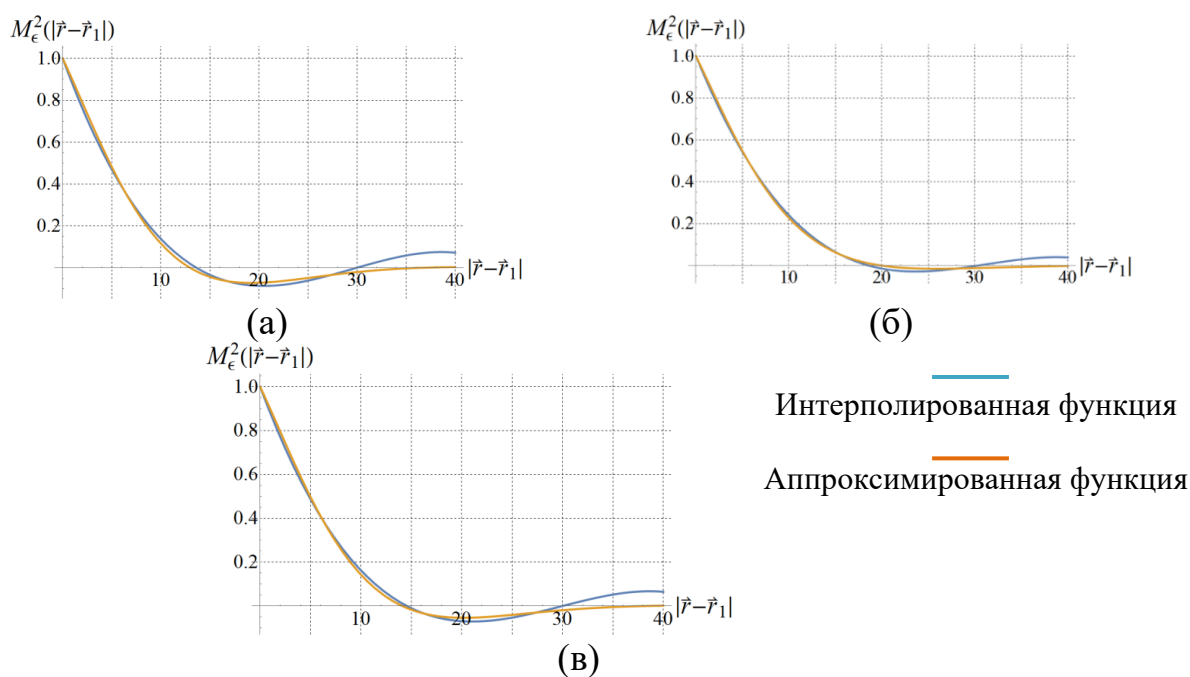


Рисунок 3.7 – Интерполированная и аппроксимированная моментная функция деформаций для структур с различным разбросом максимального размера полуоси эллипсоидальных включений: (а) от 6 до 22, (б) от 9 до 13, (в) от 4 до 24

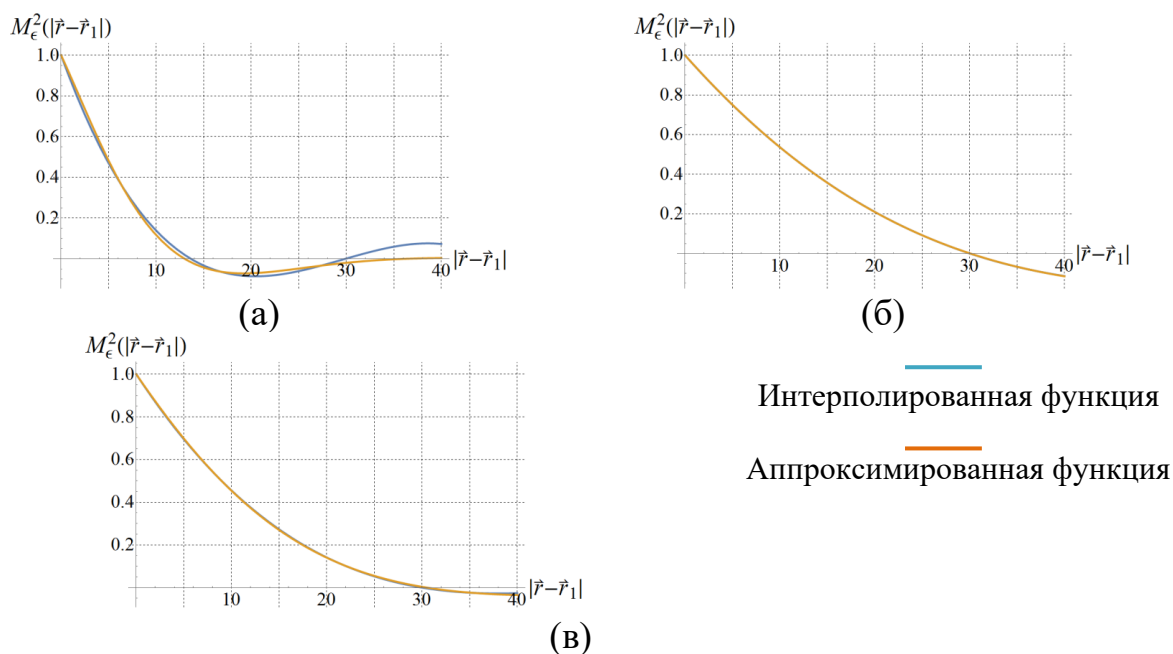


Рисунок 3.8 – Интерполированная и аппроксимированная моментная функция деформаций для структур с различной объемной долей включений: (а) 4%, (б) 10%, (в) 13%

Вид полученных корреляционных функций полей деформаций в целом схож с видом структурных моментных функций, поэтому для их аппроксимации могут быть использованы те же аналитические выражения, что и для структурных моментных функций.

Полученные результаты опубликованы в работе [138]. Корреляционные функции полей напряжений и деформаций неоднородных сред находят применение в задачах анализа и прогнозирования механического поведения сложных материалов. Они используются для количественной характеристики статистической структуры распределения напряжений и деформаций, оценки влияния микро- и мезоструктурных неоднородностей на макроскопические свойства материала, а также для выявления зон концентрации напряжений и потенциальных точек инициирования разрушения. Кроме того, такие функции применяются в методах стохастической гомогенизации и численного моделирования, обеспечивая более точное воспроизведение механических свойств композитов, пористых и гранулированных материалов, а также биологических тканей. Их использование позволяет повысить надежность прогнозов прочности и долговечности материалов, а также оптимизировать микроструктуру для достижения заданных механических характеристик.

3.4. Расчет упругих эффективных свойств двухфазных сред с использованием многоточечных статистических дескрипторов и метода интегральных уравнений

В общем случае, когда $\sigma_{ij}^* = \langle \sigma_{ij} \rangle_I p + \langle \sigma_{ij} \rangle_M (1 - p)$, а p – объемная доля включений, эффективные упругие константы неоднородной среды могут быть получены из решения системы линейных уравнений:

$$\sigma_{ij}^* = \langle \sigma_{ij}(\vec{r}) \rangle = \langle \sigma_{ij} \rangle_I p + \langle \sigma_{ij} \rangle_M (1 - p) = C_{ijkl}^* e_{kl}. \quad (3.48)$$

где C_{ijkl}^* тензор эффективных модулей упругости, компоненты которого находятся по формуле $C_{ijkl}^* = \lambda^* \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu^* (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$, e_{ij} компоненты постоянного заданного симметричного тензора малых макродеформаций, определяющего нагрузку представительного объема.

В случае пористых материалов последнее уравнение сводится к следующей зависимости:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_M (1 - p) = C_{ijkl}^* e_{kl}. \quad (3.49)$$

Выражения для средних значений напряжений и деформаций в матрице могут быть получены на основе формул для условного математического ожидания, представленных в [72]:

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_M = \langle \sigma_{ij} \rangle - \frac{1}{1-p} \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle, \quad (3.50)$$

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_I = \langle \sigma_{ij} \rangle + \frac{1}{p} \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle, \quad (3.51)$$

где $\lambda'(\vec{r})$, $\sigma'_{ij}(\vec{r})$, $\varepsilon'_{kl}(\vec{r})$ и $u'_k(\vec{r})$ являются флуктуациями, соответственно, полей случайной индикаторной функции, напряжений, деформаций и перемещений. В общем случае флуктуации случайной величины ζ в точке $\vec{r}$ определяются как $\zeta'(\vec{r}) = \zeta(\vec{r}) - \langle \zeta(\vec{r}) \rangle$, где $\langle \cdot \rangle$ оператор статистического усреднения.

Выражение для статистического момента второго порядка $\langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle$, содержащего флуктуации индикаторной функции и поля напряжений, выражается следующим образом [113, 115, 137]:

$$\begin{aligned} \langle \lambda'(\vec{r}) \sigma'_{ij}(\vec{r}) \rangle = e_{kl} \bar{C}_{ijkl} D_\lambda^{(2)} - \bar{C}_{ijkl} (1 - 2p) \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle + \\ \langle C_{ijkl} \rangle \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{kl}(\vec{r}) \rangle, \end{aligned} \quad (3.52)$$

где $\bar{C}_{mnkl} = C_{mnkl}^I - C_{mnkl}^M$ разность тензоров структурных модулей упругости включений и матрицы, $D_\lambda^{(2)} = \langle \lambda'(\vec{r}) \lambda'(\vec{r}) \rangle = p(1 - p)$ центральный момент

второго порядка (дисперсия) случайного поля индикаторной функции, выражаемый через объемную долю включений.

Тогда, с учетом соотношения (3.48), общее выражение для компонент тензора эффективных модулей упругости принимает следующий вид:

$$C_{ijkl}^* = pC_{ijkl}^I + (1 - p)C_{ijkl}^M + (C_{ijkl}^I - C_{ijkl}^M) \frac{\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon_{kl}'(\vec{r}) \rangle}{e_{kl}}, \quad (3.53)$$

$$\varepsilon_{kl}'(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(u_{k,l}'^{(x)}(\vec{r}) + u_{l,k}'^{(x)}(\vec{r}) \right). \quad (3.54)$$

Считая макрооднородный представительный объем неоднородной среды изотропным, достаточно определить только две его упругие константы. Так, учитывая, что для изотропного тензора эффективных модулей упругости $\mu^* = C_{1212}^*$, значение эффективной константы можно получить из решения задачи о чистом сдвиге.

$$\mu^* = C_{1212}^* = pC_{1212}^I + (1 - p)C_{1212}^M + (C_{1212}^I - C_{1212}^M) \frac{\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon_{12}'(\vec{r}) \rangle}{e_{12}}. \quad (3.55)$$

Значение второй эффективной константы находится из решения задачи о всестороннем растяжении:

$$\lambda^* = C_{1111}^* - 2\mu^*, \quad (3.56)$$

$$C_{1111}^* = pC_{1111}^I + (1 - p)C_{1111}^M + (C_{1111}^I - C_{1111}^M) \frac{\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon_{11}'(\vec{r}) \rangle}{e_{11}}. \quad (3.57)$$

Таким образом, эффективные модули, согласно предложенному методу, определяются как сумма их средних значений и уточняющей добавки, связанной с упругими многочастичными взаимодействиями между неоднородностями. Для вывода аналитических выражений для смешанного статистического момента второго порядка $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon_{kl}'(\vec{r}) \rangle$, определяющего величину данной добавки, используются приближения решений стохастической краевой задачи.

В явном виде значение смешанного момента $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{12}(\vec{r}) \rangle$ в выражении (3.55) для эффективной константы μ^* с использованием первого приближения (2.15) и с учетом свойств симметрии входящих в него тензоров записывается как:

$$\begin{aligned} & \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{12}(\vec{r}) \rangle^{(1)} \\ &= e_{12} \left(\bar{C}_{1212} \int_{V_1} \left(G_{11,2}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + G_{21,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_{\lambda}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[2]}} dV_1 + \bar{C}_{2112} \int_{V_1} \left(G_{12,2}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + G_{22,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_{\lambda}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[1]}} dV_1 \right). \end{aligned} \quad (3.58)$$

После преобразования получаем:

$$\begin{aligned} & \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{12}(\vec{r}) \rangle^{(1)} \\ &= 2e_{12} \bar{C}_{1212} \int_{V_1} \left(G_{11,2}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right. \\ & \quad \left. + G_{21,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_{\lambda}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[2]}} dV_1. \end{aligned} \quad (3.59)$$

Добавка, вносимая вторым приближением, выражается следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{12}(\vec{r}) \rangle^{(2)} &= 4e_{12} \bar{C}_{1212} \bar{C}_{1212} \int_{V_1} \int_{V_2} \left(G_{11,2}(\vec{r}, \vec{r}_1) + \right. \\ & \quad \left. G_{21,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) G_{11,2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{\partial^2 K_{\lambda}^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial r_{1[2]} \partial r_{2[2]}} dV_2 dV_1. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Таким образом, эффективная константа μ^* может быть определена как сумма среднего по представительному объему значения компоненты тензора $\langle C_{1212}(\vec{r}) \rangle$, а также двух слагаемых, которые являются уточнениями,

вносимыми первым и вторым приближением решения уравнения (2.14), соответственно:

$$\begin{aligned}
\mu^* = C_{1212}^* &= pC_{1212}^I + (1-p)C_{1212}^M + \\
&+ 2(C_{1212}^I - C_{1212}^M)^2 \int_{V_1} \left(G_{11,2}(\vec{r}, \vec{r}_1) + G_{21,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_\lambda^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[2]}} dV_1 \\
&+ 4(C_{1212}^I - C_{1212}^M)^3 \int_{V_1} \int_{V_2} \left(G_{11,2}(\vec{r}, \vec{r}_1) + \right. \\
&\left. G_{21,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) G_{11,2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{\partial^2 K_\lambda^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial r_{1[2]} \partial r_{2[2]}} dV_2 dV_1.
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Для определения эффективной константы λ^* запишем в явном виде момент $\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{11}(\vec{r}) \rangle$:

$$\begin{aligned}
&\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{11}(\vec{r}) \rangle^{(1)} \\
&= \frac{1}{2} e_{11} \bar{C}_{1111} \int_{V_1} \left(G_{11,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right. \\
&\quad \left. + G_{11,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_\lambda^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[1]}} dV_1 \\
&\quad + \frac{1}{2} e_{11} \bar{C}_{2211} \int_{V_1} \left(G_{12,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right. \\
&\quad \left. + G_{12,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_\lambda^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[2]}} dV_1 \\
&\quad + \frac{1}{2} e_{11} \bar{C}_{3311} \int_{V_1} \left(G_{13,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right. \\
&\quad \left. + G_{13,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \right) \frac{\partial K_\lambda^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[3]}} dV_1.
\end{aligned} \tag{3.63}$$

После упрощений данное выражение приводится к виду:

$$\langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{11}(\vec{r}) \rangle^{(1)} = e_{11} \sum_{m=n=1}^3 \bar{C}_{mn11} \int_{V_1} G_{1m,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \frac{\partial K_\lambda^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[n]}} dV_1. \tag{3.64}$$

Аналогичным образом находится добавка, соответствующая второму приближению решения:

$$\begin{aligned}
& \langle \lambda'(\vec{r}) \varepsilon'_{11}(\vec{r}) \rangle^{(2)} \\
&= e_{11} \sum_{f=s=1}^3 \sum_{m=n=1}^3 \bar{C}_{fs11} \bar{C}_{mn11} \int_{V_1} \int_{V_2} G_{1m,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \\
&\times G_{1f,1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{\partial^2 K_\lambda^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial r_{1[n]} \partial r_{2[s]}} dV_2 dV_1
\end{aligned} \tag{3.65}$$

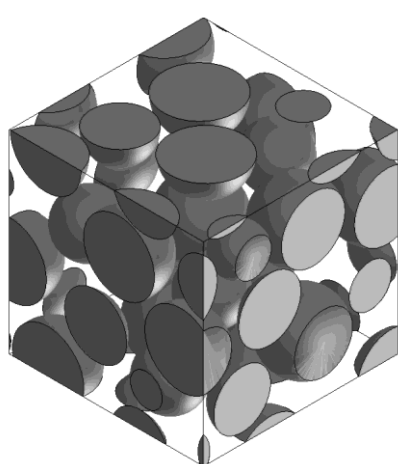
В окончательном виде формула для эффективной константы λ^* принимает вид:

$$\begin{aligned}
\lambda^* &= -2\mu^* + pC_{1111}^I + (1-p)C_{1111}^M \\
&+ (C_{1111}^I - C_{1111}^M) \sum_{m=n=1}^3 (C_{mn11}^I - C_{mn11}^M) \\
&\times \int_{V_1} G_{1m,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) \frac{\partial K_\lambda^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}_1)}{\partial r_{1[n]}} dV_1 \\
&+ (C_{1111}^I - C_{1111}^M) \sum_{f=s=1}^3 \sum_{m=n=1}^3 (C_{fs11}^I - C_{fs11}^M)(C_{mn11}^I - C_{mn11}^M) \\
&\times \int_{V_1} \int_{V_2} G_{1m,1}(\vec{r}, \vec{r}_1) G_{1f,1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{\partial^2 K_\lambda^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\partial r_{1[n]} \partial r_{2[s]}} dV_2 dV_1.
\end{aligned} \tag{3.66}$$

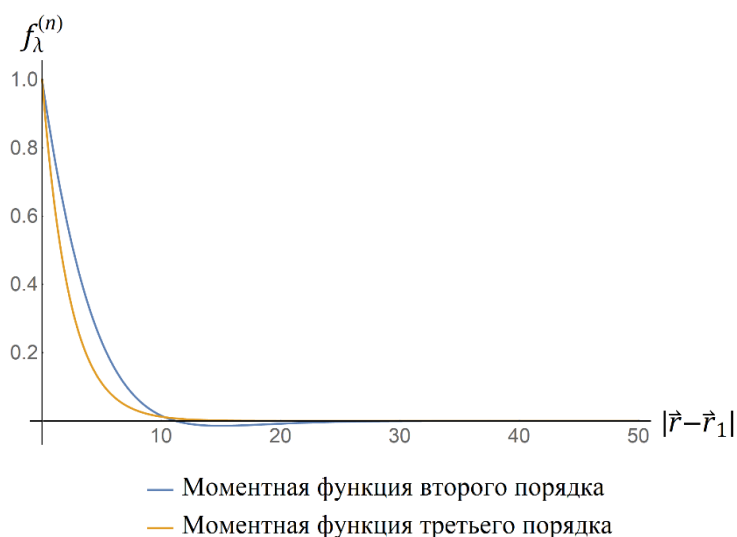
Таким образом, особенностью метода последовательных приближений является возможность уточнения значения эффективных констант в зависимости от морфологических особенностей, выражаемых через структурные моментные функции.

В приведенном ниже примере выполнено численное сравнение результатов расчета относительных эффективных характеристик пористых неоднородных полидисперсных сред со сферическими включениями с

границами Хашина-Штрикмана и сингулярного приближения, не учитывающими геометрические параметры структуры. Пример геометрической модели такой среды представлен на рисунке 3.9а. Создание модели осуществлялось методом последовательного синтеза, согласно которому каждое новое включение помещается в произвольную точку внутри куба, при этом контролируется его пересечение с уже существующими включениями. В случае наличия пересечения, данное включение отбрасывается и генерируется новое. В качестве включений использовались сферы различных радиусов, проверка пересечения между которыми осуществлялась путем расчета расстояния между центрами.



(а)



(б)

Рисунок 3.9 – (а) Представительный объем полидисперсной неоднородной среды с объемной долей включений 40%; (б) Моментные функции второго и третьего порядка для исследуемого представительного объема

Моментные функции, характеризующие неоднородную среду, получены на основе разбиения трехмерного представительного объема сеткой с фиксированным шагом и кубической формой конечного элемента (воксельная сетка). Преимущество использования такого способа получения значений моментных функций связано еще и с тем, что информацию о

представительных объемах неоднородных материалов в таком виде легко получать из экспериментальных исследований, например, на основе микрокомпьютерной томографии.

На рисунке 3.9б изображены нормированные моментные функции второго и третьего порядка вида $f_{\lambda}^{(n)}(|\vec{r} - \vec{r}_1|) = \frac{K_{\lambda}^{(n)}(|\vec{r} - \vec{r}_1|)}{D_{\lambda}^{(n)}}$, где $D_{\lambda}^{(n)}$ дисперсия n -го порядка индикаторной функции $\lambda(\vec{r})$, полученные для изображенной на рисунке 3.9а среды и используемые в выражениях (3.61) и (3.66).

На рисунке 3.10 представлены значения отношения эффективных модулей λ^* и μ^* среды к модулям матрицы. Данные величины являются безразмерными и изменяются от 0 до 1. Также, приведено сравнение с границами Хашина-Штрикмана [300] и сингулярного приближения, предложенного Т.Д. Шермергором [67]. Границы Хашина-Штрикмана эффективных констант для двухфазной неоднородной среды вычисляются по известным формулам [349]:

$$k_2 + \frac{p_1(k_1 - k_2)}{1 + \frac{3p_2}{3k_2 + 4\mu_2}(k_1 - k_2)} \leq k^* \leq k_1 + \frac{p_2(k_2 - k_1)}{1 + \frac{p_1}{3k_1 + 4\mu_1}(k_2 - k_1)}, \quad (3.67)$$

$$\mu_2 + \frac{p_1(\mu_1 - \mu_2)}{1 + \frac{6p_2(k_2 + 2\mu_2)}{5\mu_2(3k_2 + 4\mu_2)}(\mu_1 - \mu_2)} \leq \mu^* \leq \mu_1 + \frac{p_2(\mu_2 - \mu_1)}{1 + \frac{6p_1(k_1 + 2\mu_1)}{5\mu_1(3k_1 + 4\mu_1)}(\mu_2 - \mu_1)}, \quad (3.68)$$

где константы с индексом 1 относятся к компоненту с более жесткими свойствами.

Сингулярное приближение основано на приведении решения к интегральному выражению, содержащему вторую производную функции Грина, и затем выделению сингулярной составляющей из нее, сводя таким образом интеграл по сингулярной области к постоянному тензору [67]. Согласно сингулярному приближению, точное значение эффективных констант находится в границах, образованных следующими неравенствами:

$$\langle \mu \rangle - \frac{D_\mu}{(1-p)\mu_I + p\mu_M + \frac{\mu_2(9k_2 + 8\mu_2)}{6(k_2 + 2\mu_2)}} \leq \mu^* \leq \langle \mu \rangle - \frac{D_\mu}{(1-p)\mu_I + p\mu_M + \frac{\mu_1(9k_1 + 8\mu_1)}{6(k_1 + 2\mu_1)}}, \quad (3.69)$$

$$\langle k \rangle - \frac{D_k}{(1-p)k_I + pk_M + \frac{4}{3}\mu_2} \leq k^* \leq \langle k \rangle - \frac{D_k}{(1-p)k_I + pk_M + \frac{4}{3}\mu_1}, \quad (3.70)$$

где $D_\mu = p(1-p)(\mu_I - \mu_M)^2$, $D_k = p(1-p)(k_I - k_M)^2$, $\mu_1 = \langle \mu \rangle$, $\mu_2 = \langle \mu^{-1} \rangle^{-1}$, $k_1 = \langle k \rangle$, $k_2 = \langle k^{-1} \rangle^{-1}$.

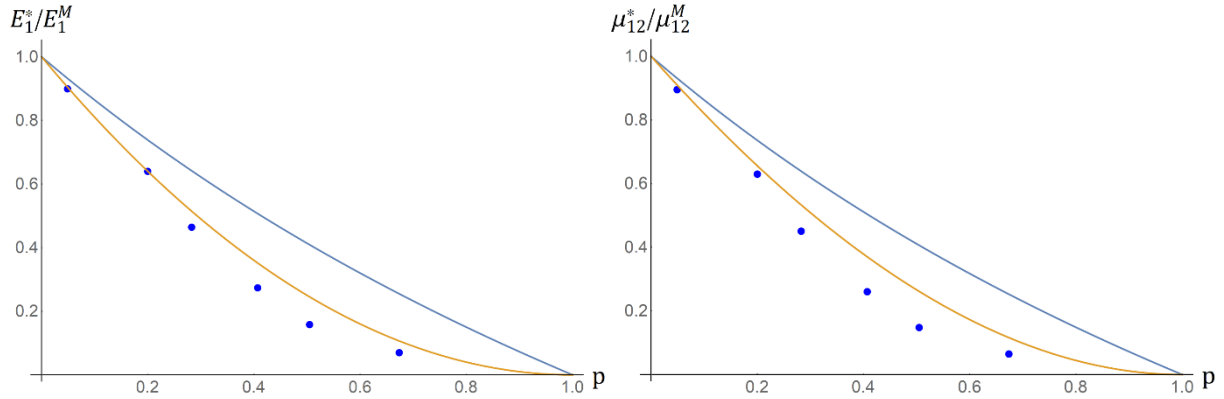


Рисунок 3.10 – Значения эффективных механических характеристик среды в сравнении с границами Хашина-Штрикмана и сингулярного приближения

Все изложенные выше алгоритмы, включая численное интегрирование, выполнены в виде кода в программной среде Wolfram Mathematica [169].

Как видно из результатов, использование предложенной методики с применением первого приближения позволяет уточнить значения эффективных констант для пористых структур с объемной долей выше 20% по сравнению с сингулярным приближением, где не используется в явном виде информация о морфологии. Установлено, что для пористых структур с равномерным распределением включений добавка, вносимая вторым приближением решения, является несущественной. В то же время значимость этой добавки увеличивается с ростом отклонения распределения включений в представительном объеме от равномерного, который может быть обусловлен формированием кластеров, сильным разбросом размеров включений и т. д. Полученные результаты опубликованы и подробно описаны в работе [143].

При использовании многоточечных моментных функций и высших приближений решения стохастических краевых задач можно получить значения эффективных свойств с точностью, превышающей традиционные аналитические методы. Прибавка в точности достигается за счет учета в явном виде морфологических особенностей микроструктуры пористой среды. Статистические характеристики высших порядков способны учитывать многоточечные взаимодействия в микроструктуре, и, будучи использованы в вычислительных выражениях для эффективных свойств, способны оказать влияние на конечный результат расчета. Однако, в то же время, при использовании статистик высших порядков увеличивается необходимое время численных расчетов. Для каждого конкретного случая необходимо искать компромиссный вариант между точностью эффективных характеристик и затраченных вычислительных ресурсов.

Таким образом, в рамках развития стохастического подхода разработан метод получения статистических моментов полей напряжений и деформаций для многофазных композитов со случайно распределенными включениями. Приведен вывод аналитических выражений для моментов первого и второго порядка локальных напряжений и деформаций в компонентах структурно-неоднородной среды с использованием многоточечных моментных функций и вторых производных функций Грина. Вычисление моментов было продемонстрировано для частных случаев представительных объемов многокомпонентных композитов со случайным расположением включений. Разработана и реализована методика вычисления значений корреляционных функций полей деформирования в упругом и упругопластическом случае при различных условиях нагружения и физико-механических характеристиках компонент композитов. Установлено, что корреляционные функции полей деформаций имеют вид аналогичный структурным корреляционным функциям, что позволяет сделать вывод о возможности использования

результатов аппроксимации, полученных для структурных функций применительно к функциям полей деформаций.

Полученные результаты в виде аналитической методики и численных расчетов могут использоваться для оценки механического поведения микроструктурных компонент неоднородной среды при заданных видах нагружения.

Предложен метод вычисления эффективных упругих характеристик полидисперсных неоднородных сред на основе применения многоточечных моментных функций. Входными параметрами данной модели являются упругие свойства компонент среды, а также формализованная в виде многоточечных моментных функций информация о морфологии среды. Полученные в явном виде выражения для эффективных констант макрооднородной изотропной среды представлены в виде средней составляющей и добавки, точность которой определяется приближением используемого решения и порядком входящих в него моментных функций.

ГЛАВА 4. Многоточечный стохастический подход к локализации микромасштабного упругого поведения случайных неоднородных сред

В соответствии со стохастическим подходом представительный объем неоднородной среды может рассматриваться как система случайных взаимодействующих компонентов с различаемыми свойствами. В этом случае внутренняя механическая реакция на нагрузку, приложенную к представительному объему, может быть выражена через непрерывные распределения микромасштабных полей напряжений и деформаций.

Как было показано, представленная стохастическая модель дает возможность вычислять центральные моменты случайных полей. Параметры законов распределения аналитически связаны с моментами случайной величины, при этом для каждого закона распределения эта связь имеет свой вид. Соответственно, для восстановления закона распределения полей деформаций или напряжений необходимо решить обратную задачу – найти такие параметры, которые соответствовали бы распределению с моментами, полученными с помощью решения краевой задачи.

В предыдущих работах, основанных на приближениях решения краевой задачи первого порядка, учитывались только моментные функции второго и третьего порядка. Так, в двухточечном приближении учитываются только парные взаимодействия, поэтому корреляционные функции более высокого порядка, чем двоичные, отбрасывались [72, 104]. Это ограничивало возможность восстановления законов распределения полей деформаций и напряжений в компонентах, так как данной информации может быть достаточно только лишь для определения параметров нормального распределения. В данной работе впервые представлены алгоритмы для

взаимосвязи многопараметрических моделей распределений полей напряжений и деформаций и структурных моментов высоких порядков.

4.1. Распределения случайных полей напряжений и деформаций

Плотность вероятности случайной величины может быть восстановлена набором моментов, если сумма $\sum_{t=0}^{\infty} \text{Exp} \left(-\kappa_2 \frac{t^2}{2!} + \kappa_4 \frac{t^4}{4!} - \dots \right) \text{Cos} \left(\sigma_{ij} t - \kappa_1 t + \kappa_3 \frac{t^3}{3!} + \dots \right)$, где κ_i это i -й центральный момент случайной величины, сходится к некоторой функцией плотности вероятности, а распределение случайной величины однозначно определяется ее моментами. Модификация методики была разработана с использованием рядов Грама-Шарлье для случаев, когда целевое распределение близко к нормальному [350]. В этом случае функция плотности распределения принимает форму:

$$f(\sigma_{ij}) = \varphi(\sigma_{ij}) - \frac{\kappa_3}{3!} \varphi^{(3)}(\sigma_{ij}) + \frac{\kappa_4}{4!} \varphi^{(4)}(\sigma_{ij}) - \frac{\kappa_5}{5!} \varphi^{(5)}(\sigma_{ij}) + \frac{(10\kappa_3^2 + \kappa_6)}{6!} \varphi^{(6)}(\sigma_{ij}) + \dots, \quad (4.1)$$

где $\varphi^{(n)}(\sigma_{ij}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} t^n \text{Exp} \left[-\frac{1}{2} \left(D_{\sigma_{ij}}^{(2)} t \right)^2 \right] \text{Cos} \left[(\sigma_{ij} - \langle \sigma_{ij} \rangle) + \frac{\pi n}{2} \right] dt$, $D_{\sigma_{ij}}^{(2)}$ это центральный момент второго порядка случайного поля σ_{ij} .

В случае, когда все кумулятивы, кроме первых двух, равны нулю (или пренебрежимо малы), плотность распределения случайной величины соответствует нормальному распределению. Тогда распределение напряжений имеет следующую форму:

$$f(\sigma_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(D_{\sigma_{ij}}^{(2)} \right)^2}} \text{Exp} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{ij} - \langle \sigma_{ij} \rangle}{D_{\sigma_{ij}}^{(2)}} \right)^2 \right]. \quad (4.2)$$

Согласно этому выражению, распределение поля напряжений может быть восстановлено с помощью двух первых центральных моментов, выражения для которых были явно выведены в главе 3.

Если предположить нормальное распределение случайной величины, то для ее восстановления требуются только первые два центральных момента:

$$\frac{1}{\beta\sqrt{2\pi}} \text{Exp} \left[-\frac{(x-\alpha)^2}{2\beta^2} \right], \quad (4.3)$$

где $\beta > 0$ параметр масштаба, α параметр сдвига.

В общем случае, из-за несимметричности функции плотности вероятности, необходимо использовать многопараметрические распределения (косое нормальное, Гамма, Вейбулла и др.), для определения которых в рамках стохастического моделирования необходимо как минимум три центральных момента. Функции плотности этих распределений имеют следующий вид.

Косое нормальное распределение:

$$\frac{2}{\beta\sqrt{2\pi}} \text{Exp} \left[-\frac{(x-\mu)}{2\beta^2} \right] \int_{-\infty}^{k\left(\frac{x-\mu}{\beta}\right)} e^{-\frac{t^2}{2}} dt, \quad (4.4)$$

где $\beta > 0$ параметр масштаба, α параметр сдвига, k параметр формы.

Гамма-распределение:

$$(x - \alpha)^{\theta k - 1} \exp \left(-\left(\frac{x - \alpha}{\beta}\right)^k \right),$$

где $\beta > 0$ параметр масштаба, α параметр сдвига, $k > 0$, $\theta > 0$ (4.5)
параметры формы.

Распределение Вейбулла:

$$\left(\frac{k}{\lambda}\right) \left(\frac{x}{\lambda}\right)^{(k-1)} \exp[-(x/\lambda)^k], \quad (4.6)$$

где $\lambda > 0$ параметр масштаба, $k > 0$ параметр формы.

Таким образом, нормальное распределение определяется параметрами масштаба и сдвига, при косом нормальном распределении добавляется параметр формы, а при Гамма распределении – два параметра формы.

Рассмотрим в качестве примера представительный объем структурно-неоднородной среды с полидисперсными частицами. Трехмерная геометрическая модель объема представляет из себя куб (матрица) со случайно расположенными непересекающимися сферами разных размеров (включения). Матрица и включения обладают изотропными механическими характеристиками. Используются модельные характеристики матрицы $E_M = 10$ ГПа, $\nu_M = 0.33$ и включений $E_I = 10^2$ ГПа, $\nu_I = 0.33$. Объемная доля включений составляет 20%. Нагружение задано в виде растягивающих перемещений $u_1 = 10^{-6}$ по оси x .

При конечно-элементном моделировании аналогичные распределения полей могут быть получены на основе анализа выборки элементов, среднее значение полей в которых попадает в тот или иной диапазон значений. Для иллюстрации методик восстановления законов распределения были исследованы модели представительных объемов пористых неоднородных материалов с малой объемной долей при растяжении (рисунок 4.1а). Результирующее поле напряжений приведено на рисунке 4.1б. Полученные гистограммы распределения компоненты напряжений σ_{11} для включений и матрицы представлены на рисунке 4.1в.

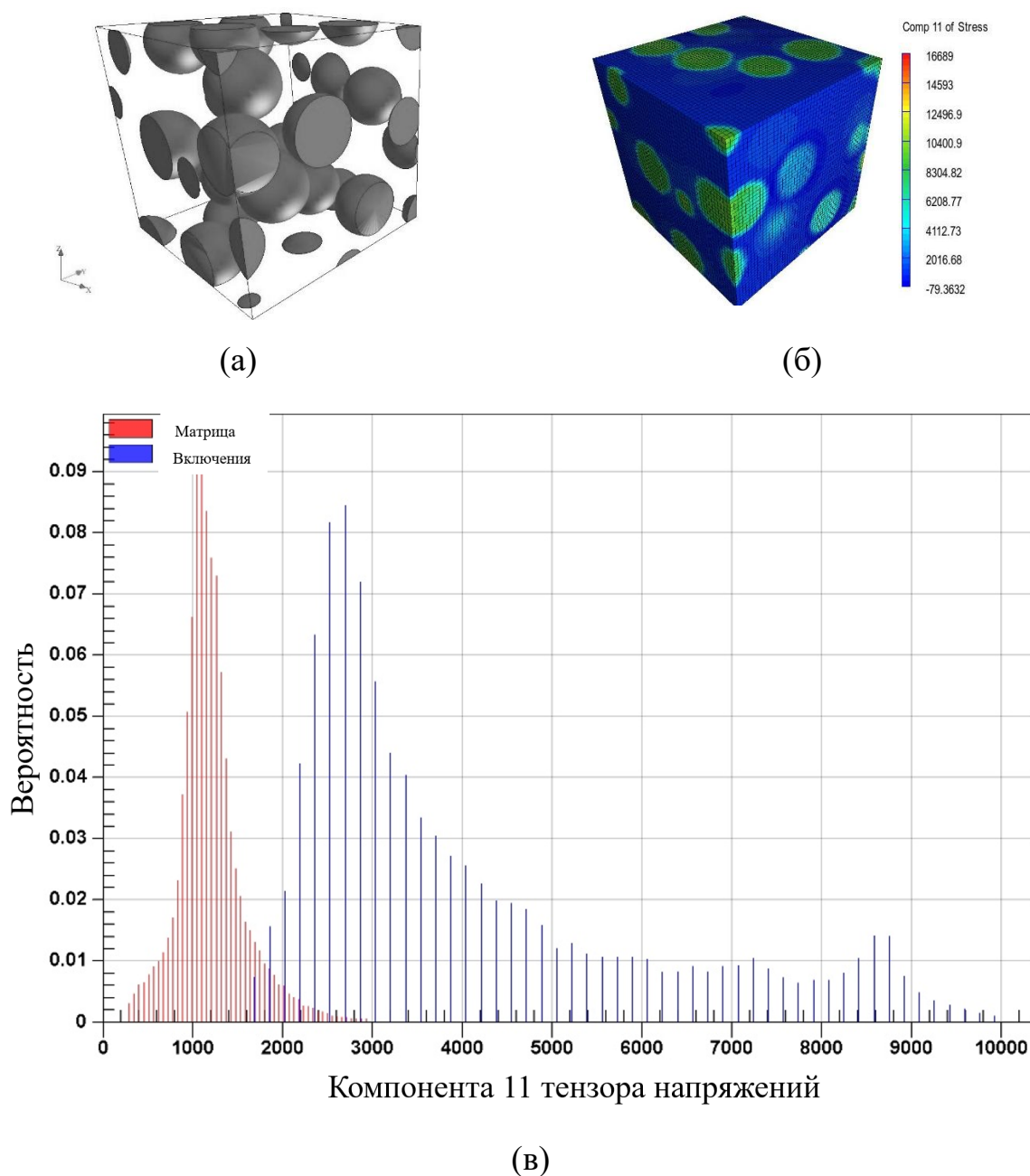


Рисунок 4.1 – Представительный объем (а) и поле напряжений в нем при растягивающем нагружении (б); распределение компоненты 11 тензора напряжений для матрицы и включений (в)

Из результатов видно, что в рассматриваемом примере распределение значений напряжений в матрице близко к нормальному закону. В таком случае, как говорилось выше, для определения параметров распределения на основе результатов стохастической модели, достаточно первых двух

центральных моментов (среднего значения и дисперсии). Для анализа распределения полей напряжения во включениях использовались косое нормальное распределение, распределение Вейбулла и гамма-распределение. Полученные коэффициенты представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Значения параметров распределений

	Матрица			Включения		
	Косое нормальное	Вэйбулла	Гамма	Косое нормальное	Вэйбулла	Гамма
Параметр сдвига α	735.018	251.972	-658.013	1914.33	1670.58	1546.75
Масштабный параметр β	591.449	1065.29	0.0140719	2928.37	2605.8	0.00301951
Параметр формы k	8.64909	2.71031	152.57	15.0564	1.26998	26.8883
Параметр формы θ	-	-	0.426703	-	-	0.245275

Графики функции плотности вероятности, построенные на основе анализа данных моделирования, для этих трех распределений представлены на рисунке 4.2.

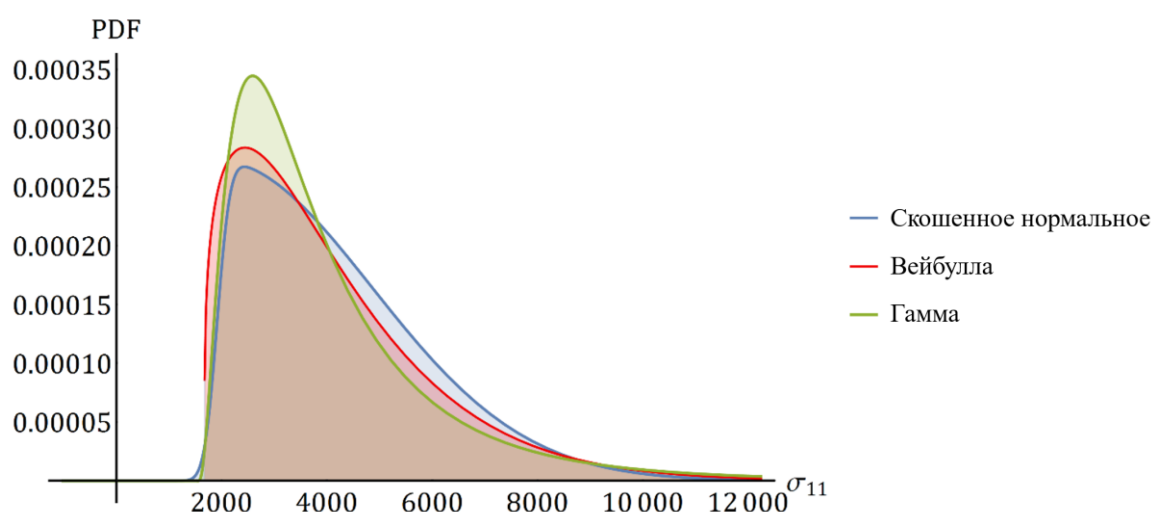


Рисунок 4.2 – Функция плотности распределения вероятности для компоненты 11 тензора напряжений для включений

Подходы для получения распределения полей напряжений и деформаций при нагружении представительного объема основаны на обратном анализе распределения случайной величины с использованием статистических метрик, в качестве которых применяются статистические моменты различного порядка. Статистические моменты, полученные для всего объема в целом и для его составляющих в отдельности, могут быть использованы в качестве параметров распределений случайных полей. В частности, они могут быть использованы как для непосредственного восстановления случайных распределений с помощью последовательных аппроксимаций, так и для получения параметров предварительно заданных параметрических распределений.

Таким образом, выбирается тип закона распределения, параметры которого определяются из решения системы уравнений, связывающих эти параметры и моменты случайной величины. Точность восстановления закона распределения зависит от порядка многоточечных моментных функций и порядка статистических моментов. Теоретически, при наличии бесконечного набора моментов n -го порядка закон распределения может быть восстановлен точно, однако, при наличии ограниченного числа моментов используются гипотезы и практические данные о характере распределения.

Описанная в главе 3 методология позволяет восстановить распределение полей напряжений и деформаций в представительных объемах и его компонентах без выполнения сеточной дискретизации, как это требуется при расчете методом конечных элементов. Это может быть наиболее полезным для обработки и исследования локализованного механического поведения материалов со сложной структурой.

Результаты, представленные в разделе, опубликованы в статье [140].

4.2. Верификация стохастического подхода с использованием метода конечных элементов

Распределения, полученные на основе стохастического подхода, были сравнены с результатами, полученными методом конечных элементов, на примере задачи о моделировании механического отклика представительных объемов взаимопроникающих случайных сред.

Хотя значения индикаторных функций могут быть получены непосредственно из экспериментов, для проведения требуемых многомасштабных исследований достаточно часто используются двух- и трехмерные модели микроструктуры материалов. Исследованы двунепрерывные модели микроструктуры, основанные на случайных взаимопроникающих фазах. Для получения таких структур граница раздела между двумя фазами может быть определена путем атрибуции значений случайной Гауссовой полевой функции в соответствии с заданным набором уровней [33]. В этом случае случайная структура может быть создана в два этапа: (1) генерация случайного поля в двух- или трёхмерном пространстве на основе случайной функции Гаусса, представленной рядами Фурье, содержащими случайные значения; (2) выставление условия, при котором точки случайного поля относятся к первой или второй фазе.

Следующая функция может быть использована для определения Гауссовых случайных полей [351, 352]:

$$Q(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N c_i \cos\left(\frac{2\pi}{a} k_i \cdot r + \varphi_i\right). \quad (4.7)$$

Здесь r позиция радиус-вектора, a размер представительного объема, N число гармоник, фазы волн φ_i равномерно распределены по интервалу $[0, 2\pi)$, направления волн k_i выбраны одинаковыми. Коэффициенты c_i принимаются случайным образом. Различные фазы представительного объема определяются путем определения точек пространства в соответствии со

следующими условиями: точка относится к фазе 1 если $Q(r) < \xi$ и к фазе 2 если $Q(r) \geq \xi$, где параметр ξ связан с объемной долей фаз.

Алгоритм был реализован в системе Wolfram Mathematica [163]. Некоторые примеры моделей двухнепрерывных представительных объемов представлены на рисунке 4.3.

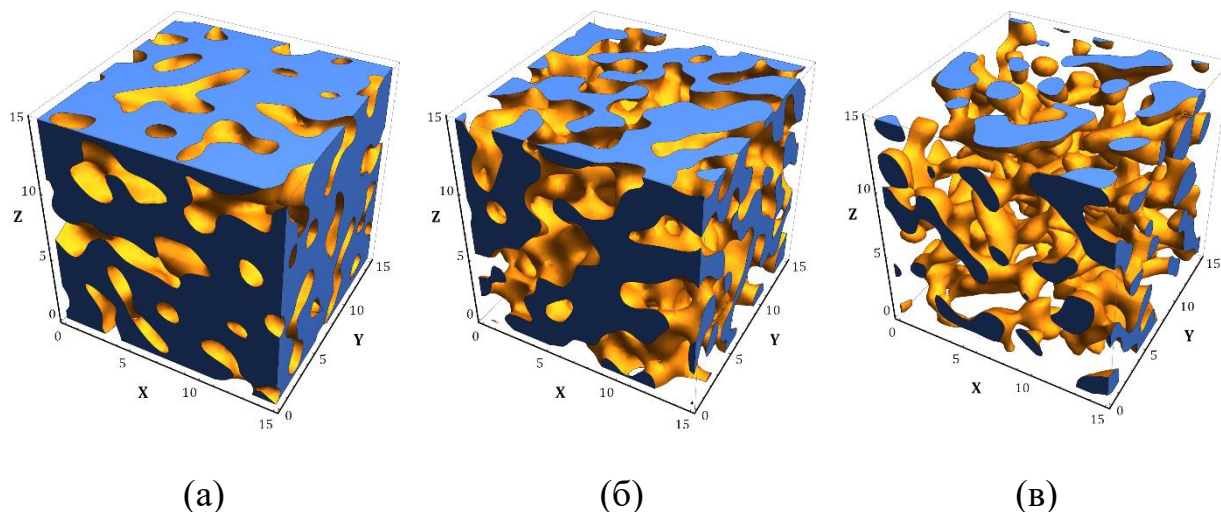


Рисунок 4.3 – Модели двухфазной двунепрерывной микроструктуры с объемной долей включений: (а) 25%; (б) 50%; (в) 75%. Отображена фаза матрицы

Исследуемые представительные объемы представляют собой двухфазные двухнепрерывные структуры с размерами (i) 5x5x5мм и объемной долей включений 25% и (ii) 15x15x15мм и объемной долей включений 50%.

На рисунке 4.4 показаны двух-, трех- и четырехточечные аппроксимированные нормализованные моментные функции, полученные с помощью воксельных моделей двухфазных двухнепрерывных моделей представительного объема с разной объемной долей включений. Трехточечные функции более чувствительны к случайности пространственного распределения фаз. Некоторые кривые демонстрируют

близкое к периодическому поведение, когда микроструктурная морфология также имеет тенденцию к высокой периодичности.

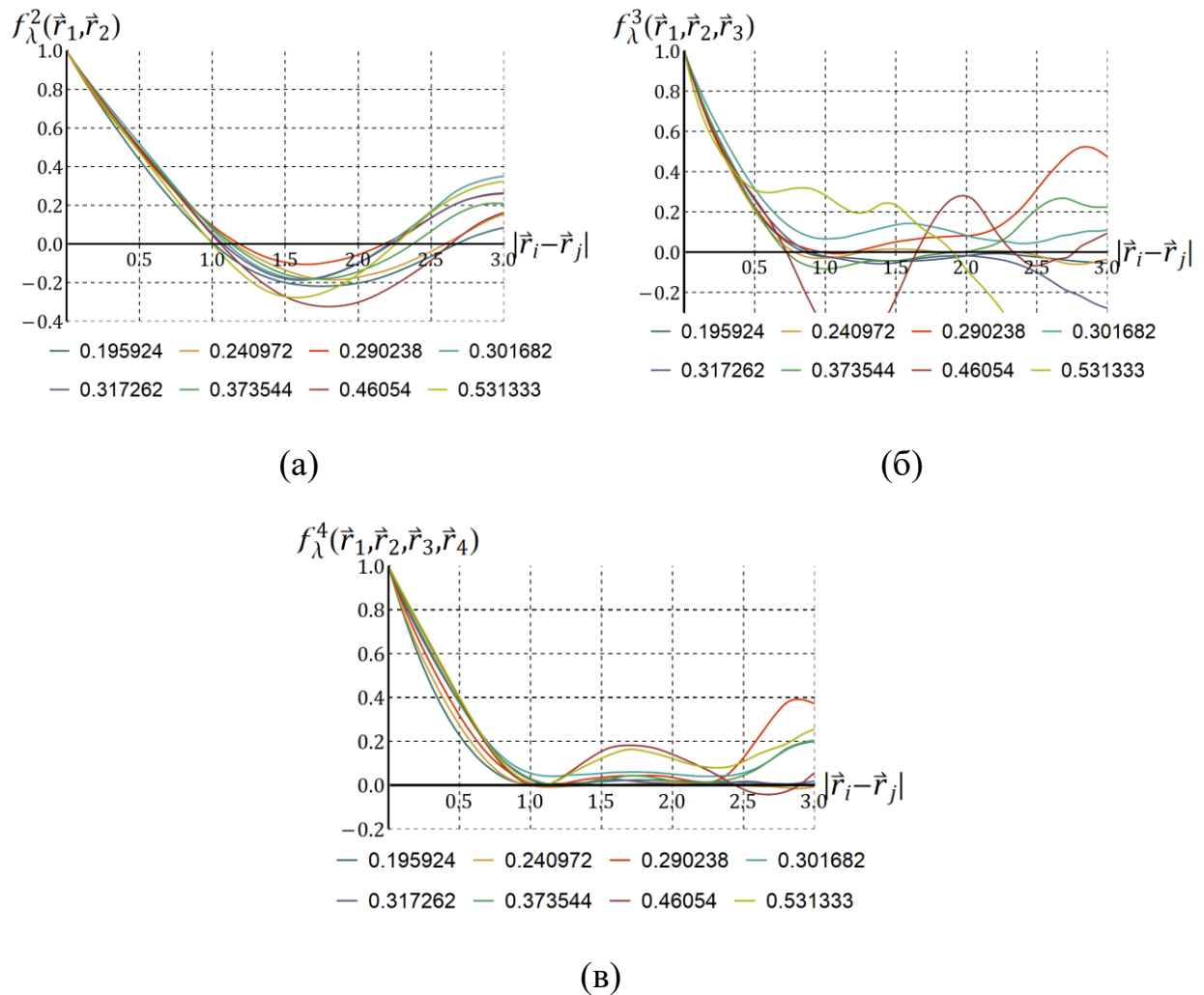


Рисунок 4.4 – Моментные функции для двухнепрерывных представительных объемов с разной объемной долей: (а) корреляционные функции; (б) трехточечные моментные функции; (в) четырехточечные моментные функции

Проведен сравнительный анализ статистических свойств представительных объемов с различными характеристиками при помощи многоточечных статистических дескрипторов. Исследована взаимосвязь изменения различных параметров микроструктуры и значений статистических дескрипторов, получены новые результаты оценки вклада многоточечных

статистик в точность формализованного представления морфологии и геометрических особенностей, таких как форма и неравномерное распределение фаз во взаимопроникающих структурах. Установлено, что моментная функция второго порядка чувствительная к вариации формы фазы. Для взаимопроникающих структур моментные функции имеют гораздо более сильно выраженную периодическую составляющую, чем для сфер. Кроме того, на скорость убывания функций в явном влияет средний размер и кластеризация неоднородностей (см. рисунок 4.5).

Моментные функции третьего порядка склонны к отклонению от асимптоты (оси абсцисс) при увеличении расстояния между радиус-векторами и увеличения степени упорядоченности структуры. Моментные функции четвертого порядка описывают кластеризацию неоднородностей, и имеют вид близкий к экспоненте. Скорость ее убывания характеризует увеличение кластеризации, а скорость затухания (стремления к нулю) – появление периодических эффектов в строении микроструктуры. Скачки в «хвостах» функций обусловлены появлением периодических составляющих при достаточно большом увеличении шага между радиус-векторами и, как правило, списываются на погрешность. Однако, разработанные в данной работе подходы позволяют учитывать их в явном виде при анализе связи морфологии структуры с эффективными свойствами.

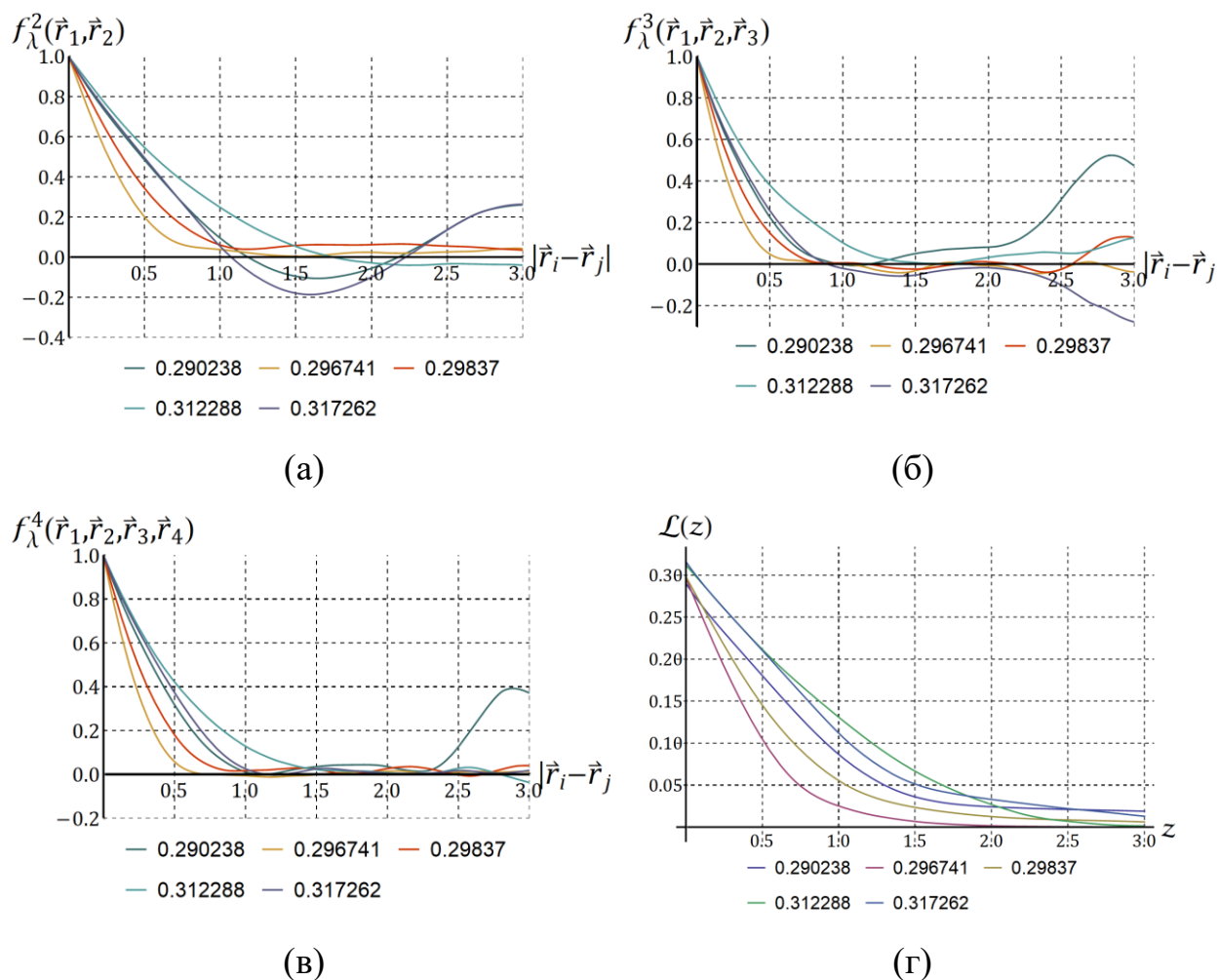


Рисунок 4.5 – Статистические дескрипторы для первой фазы взаимопроникающих структур и структур с пересекающимися сферами схожей объемной доли: (а) моментная функция второго порядка, (б) моментная функция третьего порядка, (в) моментная функция четвертого порядка, (г) функция линейного пути. Первая и последняя структуры – взаимопроникающие фазы. Вторая, третья и четвертая – пересекающиеся сферы

Дополнительно показано, что для периодических структур моментные функции четвертого и второго порядка взаимосвязаны с точностью до периода (рисунок 4.6). Эту закономерность можно использовать при установлении по имеющимся данным степени повторяемости микроструктуры.

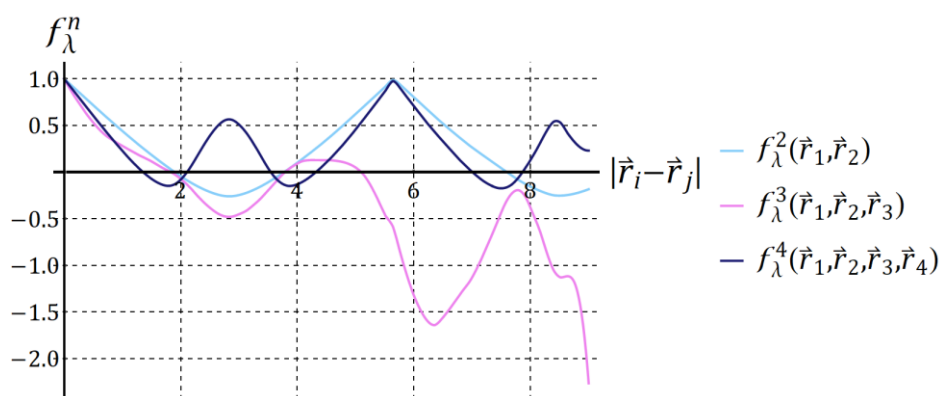
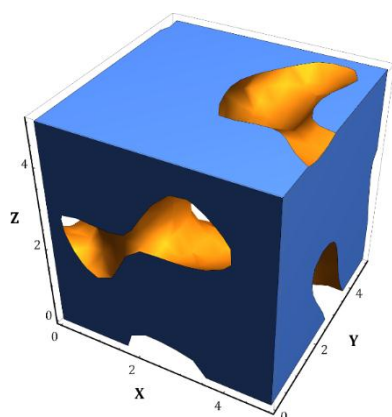


Рисунок 4.6 – Моментные функции второго, третьего и четвертого порядков для пористого представительного объема с периодической структурой и объемной долей первой фазы 40%

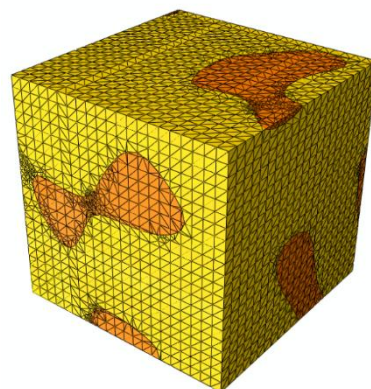
Тот факт, что статистические функции различных порядков имеют отличающийся вид говорит о том, что многоточечные взаимодействия вносят вклад в общий объем статистической информации о структуре и могут быть полезны при построении механических моделей, учитывающих морфологию представительного объема.

Для исследований методом конечных элементов модели были дискретизированы с использованием четырехузловых тетраэдрических элементов. Эти структуры и соответствующие конечно-элементные (КЭ) модели представлены на рисунке 4.7. Для примера были взяты следующие свойства фаз: матрица с модулем упругости $E_M = 70$ ГПа и коэффициентом Пуассона $\nu_M = 0.33$. Для включений были выбраны в три раза более жесткие упругие свойства при таком же коэффициенте Пуассона: $E_I = 210$ ГПа, $\nu_I = 0.33$. В анализе методом конечных элементов нагрузка представительного объема производилась по оси X со значением перемещений 0.03 мм, приложенным к плоскости YZ. В стохастической модели эффективный тензор деформаций должен быть определен как условия нагружения в

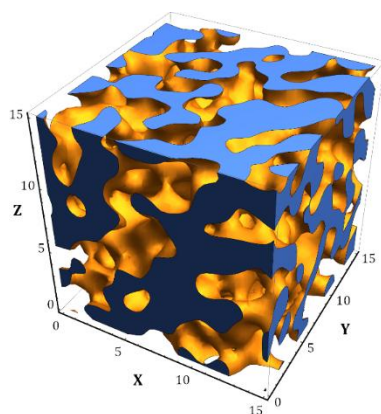
стохастической краевой задаче. Значения этого тензора были установлены в соответствии с нагрузкой конечно-элементной модели.



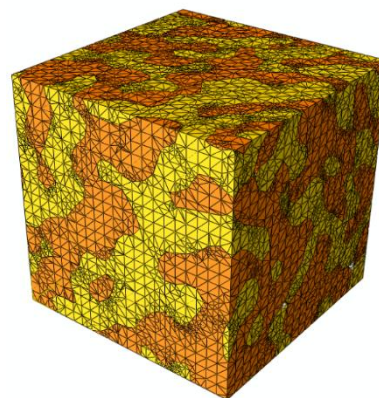
(а)



(б)



(в)



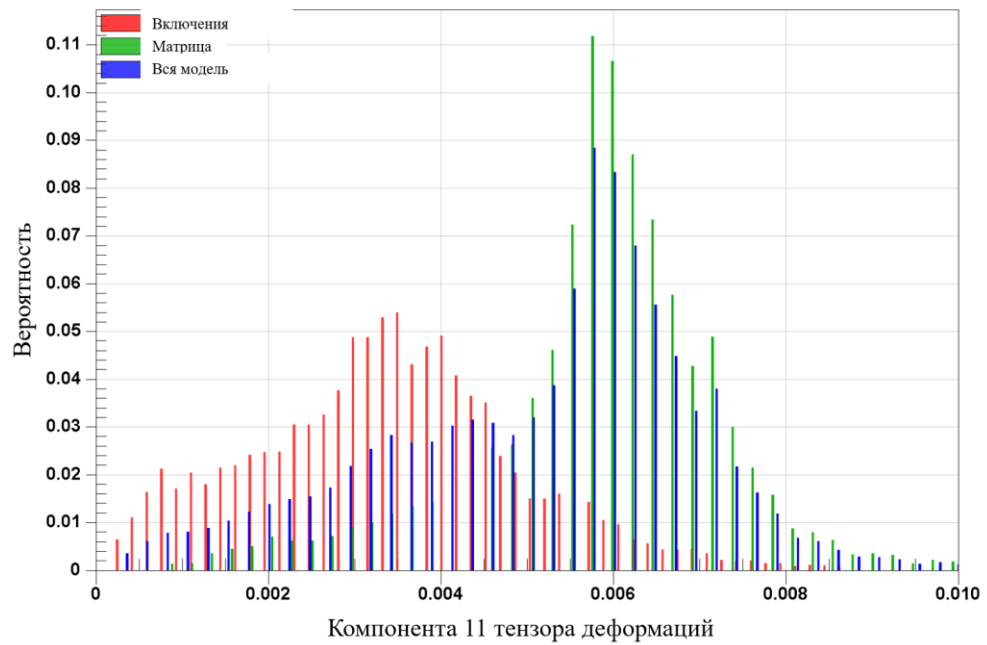
(г)

Рисунок 4.7 – Геометрия и КЭ-модели двухфазных двунепрерывных представительных объемов с (i) размерами 5х5х5мм и объемной долей включений 25% (а и б) и (ii) размерами 15х15х15мм и объемной долей включений 50% (в и г). Фаза включений скрыта в геометрических моделях (а) и (в) и отмечена желтым для КЭ-моделей

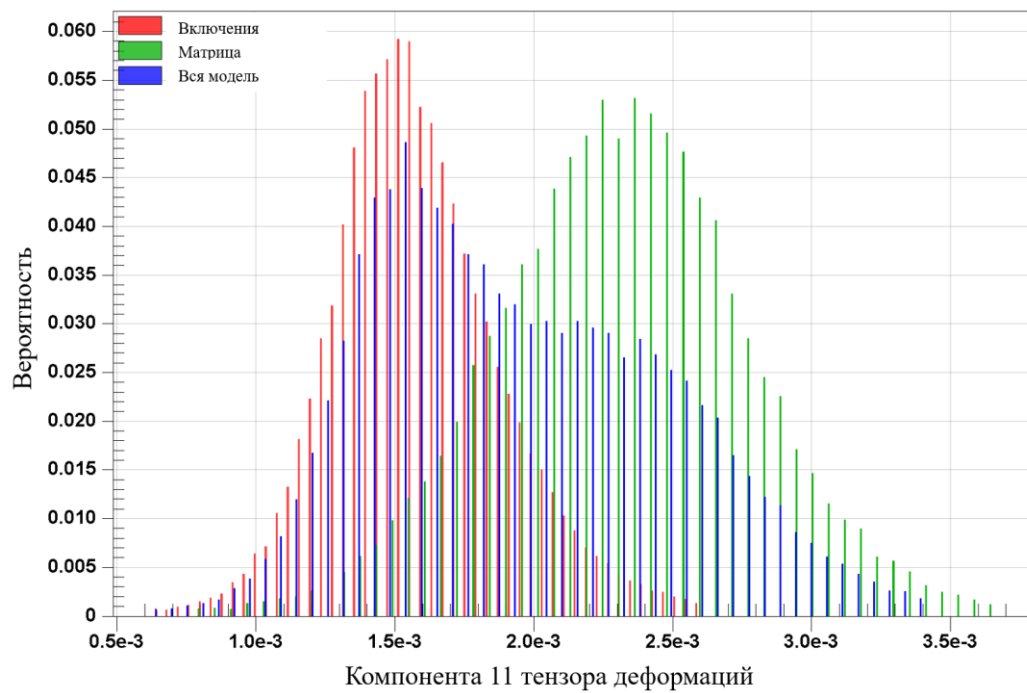
Гистограммы распределения компоненты ε_{11} тензора деформаций во включениях, матрице и всего представительного объема были получены с помощью моделирования методом конечных элементов, реализованным в Abaqus. Осреднение объемных элементов компонент тензора деформаций

проводилось как для наборов элементов, соответствующих каждой фазе, так и для всей модели в целом. Результаты представлены на рисунке 4.8 для обоих рассмотренных представительных объемов.

Функция плотности вероятности компонента тензора деформаций ε_{11} была восстановлена для всего представительного объема и каждой компоненты с использованием данных конечно-элементной модели в виде взвешенных сумм с предположением о нормальном распределении. Аналогичные функции плотности вероятности предполагаемого нормального распределения восстанавливались путем расчета параметров распределения с использованием центральных моментов первого и второго порядка, полученных в рамках стохастического подхода, в котором учитывались первые два члена разложения решения (2.18). Эти распределения были сопоставлены с нормальными распределениями из анализа методом конечных элементов. Результаты этого сравнения для рассмотренных примеров представлены на рисунке 4.9. Сплошные кривые представляют собой функции плотности вероятности, полученные с помощью стохастического подхода, пунктирные кривые – распределения, полученные на основе метода конечных элементов.

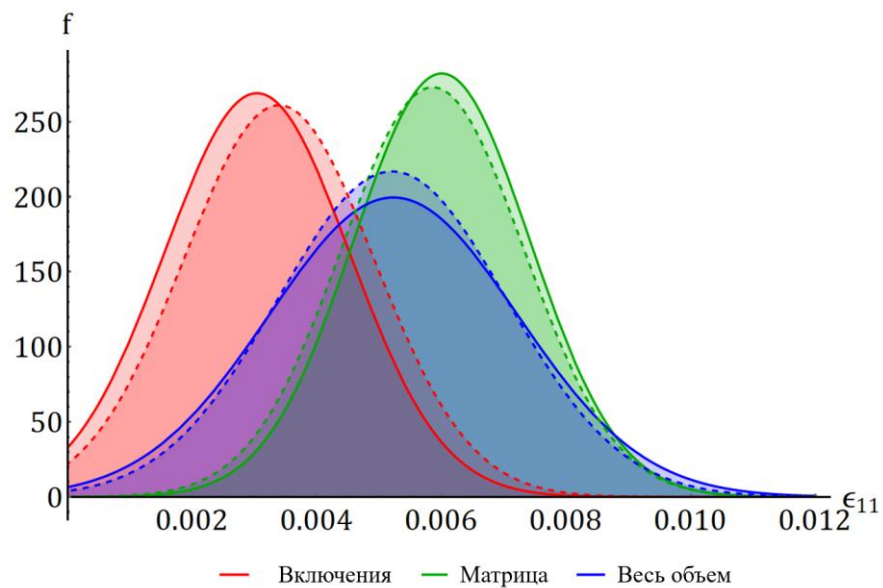


(а)

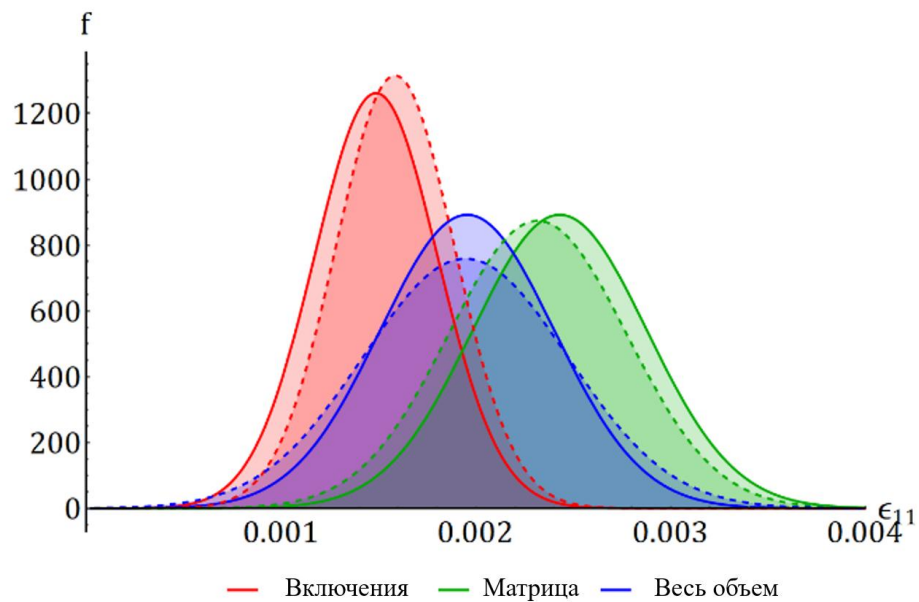


(б)

Рисунок 4.8 – Гистограмма распределения компоненты ε_{11} тензора деформаций в элементах КЭ-модели для двухфазного представительного объема с размером 5 мм и объемной долей включений 25% (а) и двухфазного представительного объема с размером 15 мм и объемной долей включений 50% (б)



(а)



(б)

Рисунок 4.9 – Сравнение функций плотности вероятности для компоненты ϵ_{11} тензора деформаций в представительном объеме и его фазах при стохастическом подходе (сплошные линии) и моделировании методом конечных элементов (пунктирные линии) для взаимопроникающих структур с объемной долей включений (а) 25% и (б) 50%

Распределения, полученные в рамках стохастического подхода, показали хорошее соответствие с результатами численного конечно-элементного моделирования для обоих случаев. Положение пиков функций плотности вероятности определяется средними значениями случайного поля, которые вычислялись отдельно в рамках каждого подхода для каждой составляющей. среднее значение компонента тензора деформаций для гомогенизированного представительного объема было идентично для формулировок стохастических задач и метода конечных элементов по определению, в соответствии с граничными условиями, применяемыми для конкретного случая. Центральный момент второго порядка определяет ширину нормального распределения случайных величин. Форма полученных функций плотности вероятности позволяет сделать вывод о том, что моменты второго порядка были рассчитаны корректно.

Гистограммы для результатов моделирования методом конечных элементов имеют несколько локальных пиков. Природа этих пиков оказалась обусловлена разбиением геометрии сеткой и количеством элементов в сетке. После аппроксимации гистограмм с предположением о нормальном распределении эти пики выравниваются.

Специфика стохастического подхода заключается в том, что он выдает распределения, на которые не влияет какая-либо процедура дискретизации. На них влияют только морфологические особенности, отраженные в моментных функциях. Более сложные модели распределений имеют больше параметров и поэтому потребуют большего количества статистических характеристик. Следовательно, они будут собирать больше микроструктурной информации из моментных функций более высокого порядка. Однако это может не привести к каким-либо изменениям в полученных распределениях. Для рассмотренных конкретных случаев в качестве моделей распределения компонента тензора деформаций в фазах были также испытаны косое нормальное распределение и

распределение Вейбулла, однако полученные результаты были такими же, как и для нормального распределения. Это означает, что учет корреляций более высокого порядка для этих конкретных случаев является избыточным, и только первые два момента полей деформации являются достаточными для восстановления соответствующих распределений.

Из результатов на рисунке 4.9 видно, что распределение деформаций, усредненного по всему представительному объему, отклоняется от нормального распределения. В этом случае учет статистических моментов более высокого порядка мог бы быть оправдан, однако более простым способом является получение этого распределения путем смешивания распределений отдельных фаз с равными весовыми коэффициентами (см. рисунок 4.10).

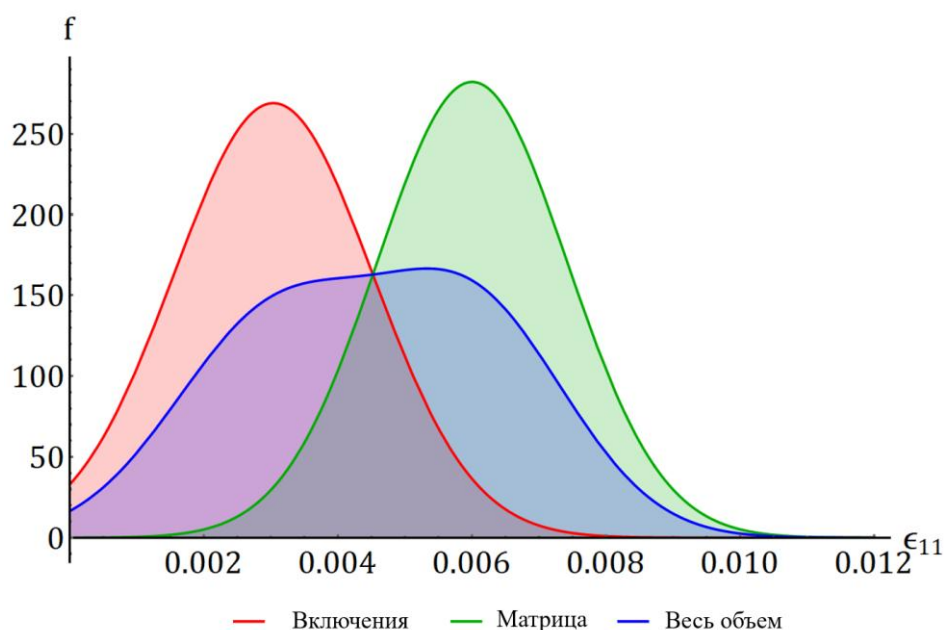


Рисунок 4.10 – Функции плотности вероятности для тензора деформаций в представительном объеме и отдельных фазах для структуры с объемной долей включений 25%, полученные в рамках стохастического подхода.

Функция плотности вероятности для всего представительного объема целиком получается путем смешивания распределений для составляющих

Точность определения распределений в рамках стохастического подхода зависит от (i) количества статистических моментов, рассчитываемых для полей напряжений и деформаций; (ii) количества рассматриваемых членов в решении стохастической краевой задачи, определяющем порядок требуемых моментных функций. Характерная для стохастического подхода структура подразумевает, что каждый последующий член в последовательных разложениях случайных величин вводит некоторое уточняющее дополнение к конечному результату. С каждым новым членом в ряду значение и абсолютная величина новых добавок уменьшается. Таким образом, для вычисления первых членов разложений крайне важно поддерживать максимальную точность.

В общем случае, если морфология представительного объема статистически однородна, что означает отсутствие кластеризации включений или значительных изменений размеров в пределах одной фазы, то распределения случайных полей локальных напряжений и деформаций в представительном объеме ожидаются близкими к нормальным. Это означает, что для восстановления этих распределений необходимы только первые два статистических момента. Однако для получения более точных результатов можно использовать несколько членов в расширении решения стохастической краевой задачи, особенно для моментов первого порядка (средних значений) полей, так как они будут определять пиковые положения функций распределения. В случае более сложной статистически неоднородной морфологии может быть полезно использовать косое нормальное распределение, требующее также статистический момент третьего порядка. Параметр формы, определяемый этим моментом, отвечает за изменение нормального распределения достаточно сильно, чтобы охватить, например, эффекты кластеризации включений.

Вычислительные ресурсы, необходимые для численной реализации стохастического подхода, зависят, во-первых, от методов численного интегрирования и, во-вторых, от процедуры получения значений корреляционных функций. Получение значений моментных функций является отдельной задачей, скорость решения которой зависит от выбранного метода и формата исходных входных данных (см. главу 2). Система Wolfram Mathematica использовалась в этой работе для полного цикла вычислительных работ, от создания геометрии до численного интегрирования [164, 171–173]. Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в работе [119].

4.3. Вероятность разрушения неоднородных сред

Одно из возможных применений статистик локальных микроструктурных полей — создание статистических моделей разрушения компонентов, где они используются для определения момента начала разрушения, а также для разработки новых критериев прочности, способных адекватно отражать процессы деформации и разрушения.

Методы и инструменты статистического анализа позволяют исследовать распределения с аналитической точки зрения для их использования в моделях механики. В таком случае, например, характеристики разрушения представительного объема и его компонент могут быть выражены в вероятностных величинах. В данной работе представлен подход, позволяющий исследовать вероятность начала разрушения отдельных фаз представительного объема на основе статистического представления критерия разрушения и восстановления функций распределения напряжений и деформаций.

В простом случае вероятность разрушения P определяется по законам распределения компонентов тензора напряжений или деформаций как:

$$P[F(\sigma_{ij}, \sigma_{max}) > 1, \sigma_{ij} \sim dist],$$

$$P[F(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{max}) > 1, \varepsilon_{ij} \sim dist].$$
(4.8)

Здесь F это критерий разрушения, $\sigma_{ij} \sim dist$ и $\varepsilon_{ij} \sim dist$ обозначает распределение компонентов тензора напряжения в соответствии с законом распределения $dist$, σ_{max} и ε_{max} константы прочности. Графический смысл вероятности разрушения – это площадь под графиком плотности распределения компоненты σ_{ij} , ограниченная слева критическим значением $\sigma_{ij}^{(cr)}$ (рисунок 4.11).

Типичные функции плотности вероятности для компонентов тензора напряжений для некоторого материала при одноосном растяжении нагрузки представлены на рисунке 4.11. Значение максимальных напряжений обозначено на графике красной линией. Вероятность разрушения может быть определена как область, ограниченная кривой плотности вероятности (σ_{11} в рассматриваемом примере) сверху, бесконечностью справа, линией максимальных напряжений σ_{max} слева и осью X снизу.

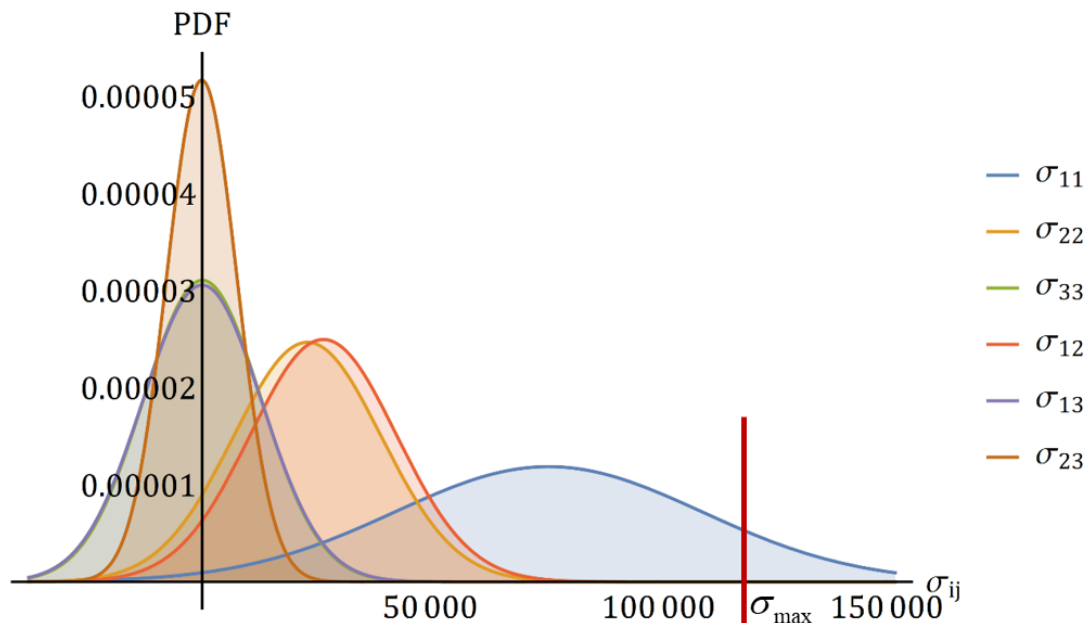


Рисунок 4.11 – Иллюстрация принципа вычисления вероятности разрушения и типичные распределения компонентов тензора напряжений

При рассмотрении многофазного материала подобное представление может быть введено как для каждой фазы материала в отдельности, так и для среды с эффективными свойствами. Таким образом, для оценки вероятности разрушения материала необходима оценка закона распределения напряжений в представительном объеме и его компонентах.

В общем случае, когда, например, свойства фаз не изотропны, может быть использован более сложный критерий (критерии Хашина, Цай-Ву, Мизеса и другие). Закон распределения значений выражений для таких критериев можно получить в виде трансформации законов распределения входящих в него компонент тензоров напряжений или деформаций:

$$\begin{aligned} P\{F(\sigma_{ij}, X_\sigma) > 1, \sigma_{ij} \sim dist\}, \\ P\{F(\varepsilon_{ij}, X_\varepsilon) > 1, \varepsilon_{ij} \sim dist\}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

где X_σ, X_ε совокупность критических констант, входящих в критерий.

Для полученных законов распределения напряжений σ_{11} в матрице можно получить зависимость вероятности разрушения от значения критической константы $\sigma_{11}^{(cr)}$ (рисунок 4.12).

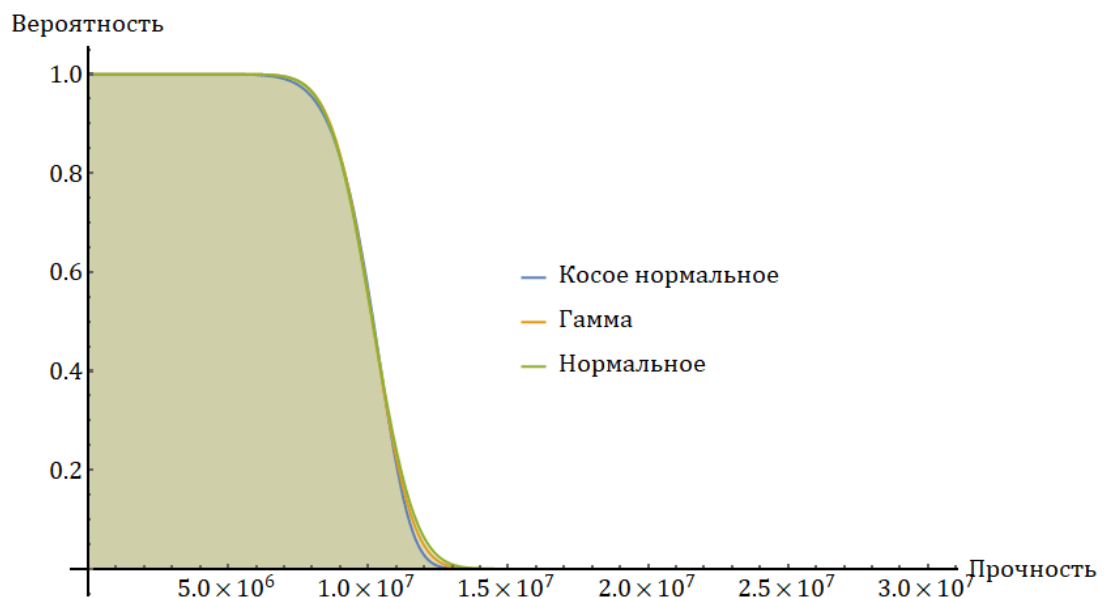


Рисунок 4.12 – Значение функции вероятности выполнения критерия в зависимости от предела прочности $\sigma_{11}^{(cr)}$ для матрицы

Графики функции вероятности разрушения для полученных законов распределения напряжений σ_{11} в матрице и включениях при переменном значении критической константы σ_{cr} представлены на рисунке 4.13. Более подробные результаты опубликованы в работе [140].

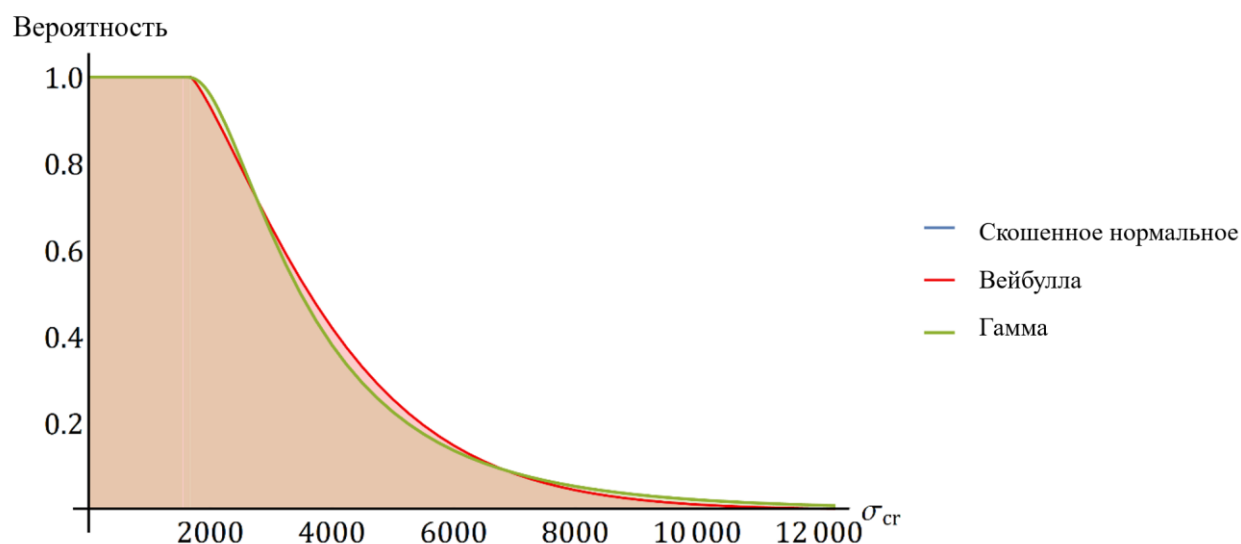


Рисунок 4.13 – Значение функции вероятности выполнения критерия в зависимости от предела прочности для включений

Таким образом, одним из возможных применений для статистик локальных микроструктурных полей является создание статистических моделей разрушения в компонентах, где они используются для обнаружения момента начала разрушения, а также для создания новых критериев прочности, что может адекватно отражать процессы деформация и разрушения.

4.4. Способы экспериментальной верификации статистических распределений полей деформаций

Для экспериментальной верификации результатов стохастического моделирования могут быть использованы различные экспериментальные методики, позволяющие регистрировать распределенные поля деформаций.

Так, для визуализации поверхностных деформаций при испытаниях может быть использована бесконтактная система цифровой корреляции изображений [353]. Сравнивая смещения заданного текстурного рисунка на поверхности образца в процессе деформации, этот метод обеспечивает неразрушающий и бесконтактный подход к изучению деформационного поведения материалов и конструкций. Для создания контрастного изображения текстуры на поверхности образца применялся черно-белый случайный спекл-шаблон: поверхность изготовленных образцов окрашивалась в белый цвет с последующим добавлением черных спеклов с помощью аэрографа (рисунок 4.14).

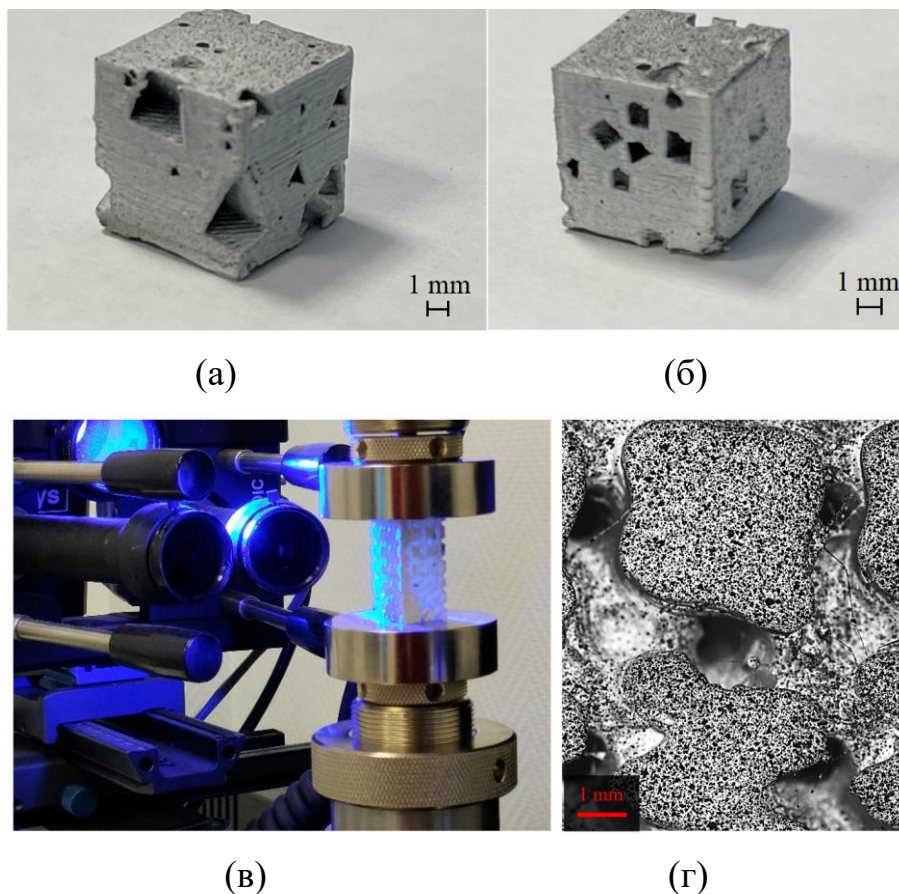


Рисунок 4.14 – 3D-печатные образцы с тетраэдрической (а) и кубической (б) формой пор; (в) экспериментальная установка; (г) пример микро-спеклов на поверхности образца

Сравнение полей деформации на поверхности некоторых пористых образцов, полученных численно и экспериментально, приведено на рисунке 4.15. Для съемки передней поверхности образцов использовались две цифровые камеры с разрешением 5 Мп и частотой 1 Гц. После настройки камер производилась калибровка системы DIC с помощью программы VicSnap. Набор изображений, полученных в ходе эксперимента, анализировался с помощью программы Vic-3D 9 для расчета полей перемещений и деформаций. Поле зрения системы Vic-3D Micro-DIC составляло $8,4 \text{ мм} \times 7 \text{ мм}$, что позволяло получать детальные изображения элементарной ячейки.

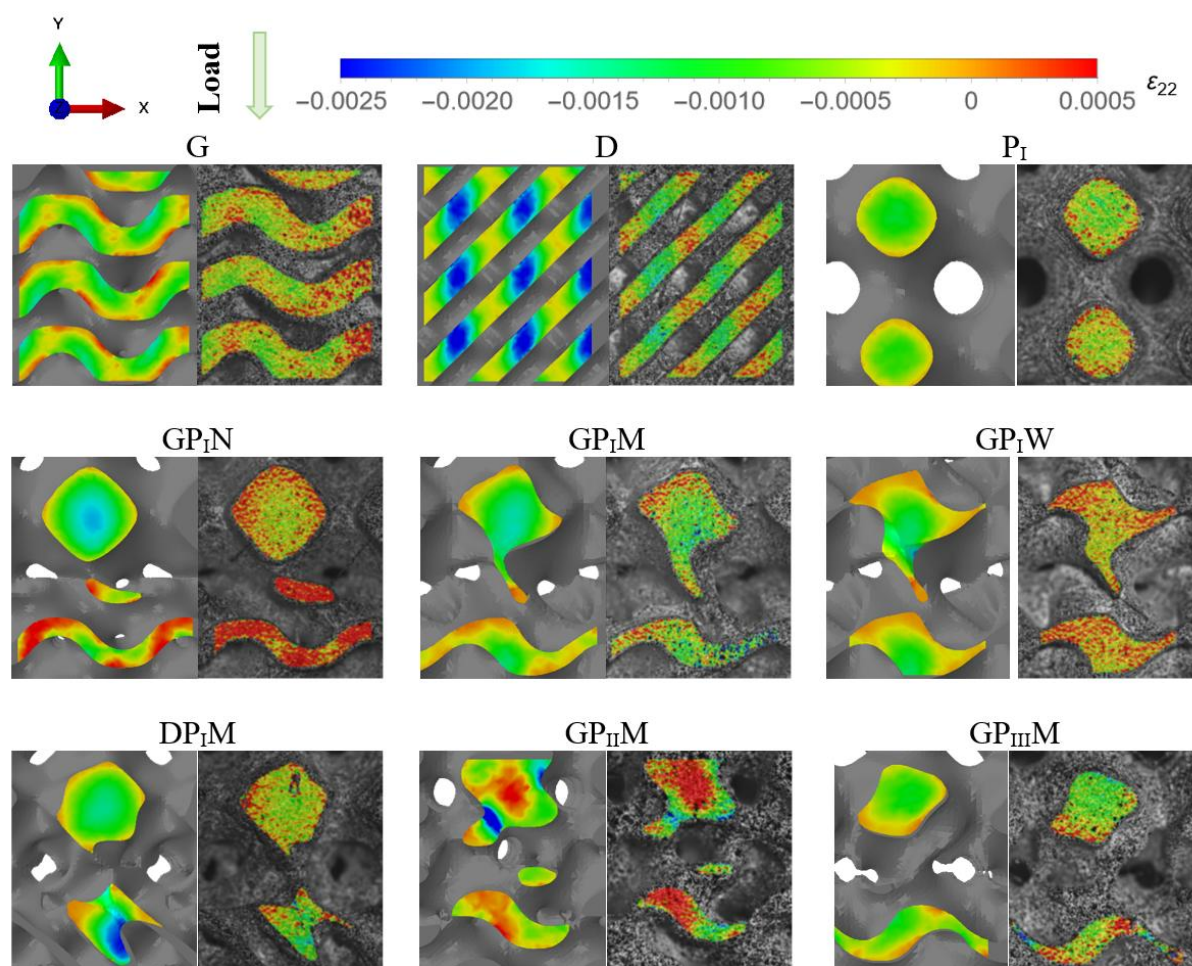


Рисунок 4.15 – Сравнительный анализ поведения распределения деформаций в решетчатых структурах под нагрузкой 500 Н, полученных на передней поверхности образцов численно (слева) и экспериментально (справа)

Полученные результаты применения данного подхода для сравнения результатов моделирования и экспериментального исследования различных пористых аддитивно изготовленных структур были опубликованы в работах [123, 126].

Одно из наиболее перспективных направлений в области мониторинга механического состояния конструкций в процессе их эксплуатации связано с созданием интеллектуальных материалов и интеллектуальных систем на основе интегрированных сенсорных элементов [354–356]. Возможности таких сенсоров по измерению механического состояния окружающей среды обусловлены использованием волоконных брэгговских решеток (ВБР), которые вызывают периодическое изменение показателя преломления сердечника оптического волокна, подвергающегося внешнему воздействию [357–361]. Принцип работы этих датчиков основан на сравнении длины волны света, передаваемого на решетку Брэгга и отраженного от нее. Каждое оптическое волокно может нести в себе несколько датчиков ВБР, способных обеспечить независимые измерения. Такие датчики могут встраиваться между слоями композитного ламината без ущерба для общих механических свойств [362, 363]. В зависимости от технологии волоконно-оптические датчики способны обнаруживать изменения полей деформации, температур и т.д. Они способны выдерживать деформации, сравнимые с деформациями конструкций, имеют высокое разрешение измеряемых параметров, длительный срок службы, небольшие габариты, а также нечувствительны к коррозии и электромагнитным помехам.

Будучи интегрированными в структуры в процессе аддитивного производства, они позволяют осуществлять мониторинг конструкций как в ходе изготовления, так и в процессе эксплуатации [151, 356, 357, 363–377]. Созданная таким образом система мониторинга позволит оценивать технологические напряжения в процессе производства, контролировать

деградацию свойств материала при длительном хранении под воздействием факторов окружающей среды (влажность, ультрафиолетовое излучение и т.д.), регистрировать деформации под эксплуатационными нагрузками и дополнительные внешние воздействия.

Принцип работы датчиков основан на сравнении длины волны света, который передается и отражается от ВБР [368, 378]. Опросник генерирует и передает в оптическое волокно широкополосный световой сигнал в заданном интервале длин волн. Каждая ВБР отражает некоторую специфическую длину волны этого сигнала λ^* . Величина этой волны прямо пропорциональна эффективному коэффициенту преломления n и геометрической длине периода решетки Брэгга L :

$$\lambda^* = 2nL. \quad (4.10)$$

Когда волокно находится в деформированном состоянии, период решетки меняется, а, следовательно, и длина волны отраженного света (рисунок 4.16).

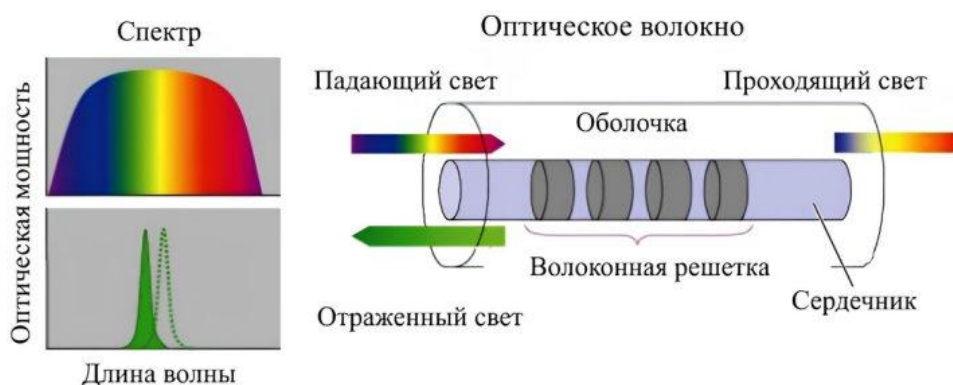


Рисунок 4.16 – Принцип работы волоконно-оптического датчика с решеткой Брэгга

Значения деформаций, получаемых от датчиков, зависят от относительного значения резонансной волны спектра, отраженной решеткой Брэгга, изменения температуры оптического волокна в месте расположения

решетки, деформации и температурных коэффициентов. Относительная величина резонансной длины волны отраженного спектра $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ связана с компонентами тензора деформаций следующим образом [368, 378, 379]:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \varepsilon_{11} - \frac{1}{2}n^2(p_{11}\varepsilon_{22} + p_{12}(\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11})) + K_T\Delta T, \quad (4.11)$$

где $\Delta\lambda = \lambda - \lambda^*$ – разница между значениями длин резонансных волн отраженного спектра в текущем λ^* и начальном λ моментах времени соответственно, ε_{ij} является тензором деформации, n – показатель преломления оптического волокна, p_{11} и p_{12} являются коэффициентами Покекса упруго-оптического тензора, K_T является коэффициентом теплового расширения. При постоянной температуре последний член становится пренебрежимо малым ($\Delta T = 0$). Важной особенностью решеток Брэгга является то, что, как видно из этого соотношения, длина волны отраженного спектра зависит от изменения деформаций во всех трех направлениях.

Волоконно-оптические датчики могут быть встроены между слоями, но они также могут быть закреплены на поверхности образца или структуры. Точность измерения деформации зависит от того, насколько окружающая среда способна передавать деформации объекта на датчик. В реальных условиях эксплуатации оптоволоконный датчик обычно подвергается воздействию микромасштабных компонентов структуры, влияние которых необходимо учитывать при интерпретации измерений датчиков.

В данной работе был разработан подход, согласно которому данные измерений локальных деформаций, полученные экспериментально от волоконно-оптических датчиков, используются для уточнения упругих механических характеристик конечно-элементной модели. Он направлен на оценку разницы между предсказанной, с использованием конечно-элементной модели, ответной реакцией на деформацию в конструкции и данными, полученными в реальном времени с помощью датчиков деформации. По

разнице между экспериментально измеренными и рассчитанными деформациями в контрольных точках, взятыми при одном и том же значении нагрузки, строится функция, которая должна быть минимизирована в рамках решения задачи оптимизации. Таким образом, можно найти такие значения материальных констант, которые при заданной нагрузке приведут результаты расчета в соответствии с деформациями, зарегистрированными датчиками деформаций.

В соответствии с предложенным подходом в качестве параметров оптимизации используются материальные константы, которые должны обеспечивать согласованность результатов моделирования и измерений ВБР в контрольных точках. Поскольку измерения, проводимые датчиками ВБР, могут быть преобразованы в значения деформаций, которые соответствуют текущему механическому состоянию датчиков ВБР, то задачу оптимизации удобно решать с учетом минимизации разницы между деформациями, рассчитанными методом конечно-элементного моделирования ε^{FEM} и измеренными в реальных образцах ε_i^{FBG} . Аппроксимация констант материала в итоге должна обеспечить согласованность результатов моделирования и измерений датчиков ВБР в контрольных точках. Для оптимизации параметров создается регрессионная модель.

В идеальном случае одноосного растяжения оптического волокна, не взаимодействующего с окружающей средой, компоненты ε_{22} и ε_{33} тензора деформаций выражаются через отношение Пуассона оптического волокна и компоненту ε_{11} тензора деформаций. Этот случай может быть реализован, например, когда волокно зафиксировано в двух точках на измеряемой поверхности. Тогда осевая деформация оптического волокна будет точно такой же, как и деформация поверхности объекта. Подставляя в выражение физические свойства наиболее распространенных типов оптических волокон, можно получить следующую зависимость [357–359, 380]:

$$\frac{4\lambda}{\lambda} \approx 0.78\varepsilon_{11}. \quad (4.12)$$

При этом допущении значения деформации в осевом направлении могут быть непосредственно извлечены из данных ВБР и использованы в задаче оптимизации.

Для оптимизации упругих констант создается регрессионная модель и используется алгоритм Левенберга-Марквардта, который обычно предполагает последовательные аппроксимации заданных начальных значений параметров к искомому локальному оптимуму [381, 382].

Регрессионная выборка (ε_{ij}, F) включает в себя значения деформаций ε_{ij} в контрольной точке, которые являются реакцией на приложенное значение нагрузки F . В случае, когда тело считается изотропным, в качестве регрессионной функции может быть использована конститутивная зависимость для изотропных сред, соединяющих тензоры напряжения и деформации. Если оптическое волокно ориентировано по оси 1, то функция регрессии записывается как:

$$\varepsilon^{FEM}(p, \sigma_{ij}) = \varepsilon_{11} = \frac{1}{E}(\sigma_{11} - \nu(\sigma_{22} + \sigma_{33})), \quad (4.13)$$

где напряжения σ_{ij} зависят от прилагаемой нагрузки F . Этот переход к напряжениям осуществляется для того, чтобы иметь возможность вводить в качестве параметров упругие константы. Таким образом, необходимо получить из модели значения компонентов тензора напряжений в контрольных точках.

Можно задать следующую задачу оптимизации - найти такое значение вектора параметра, которое привело бы к минимуму функцию:

$$M = \sum_{i=1}^N \frac{1}{w_i} \left(\varepsilon_i^{FBG}(F) - \varepsilon_i^{NUM}(p, \sigma_{ij}) \right)^2, \quad (4.14)$$

где ε_i^{FBG} значения деформации в контрольной точке i , полученные с помощью датчиков ВБР под нагрузкой F , $\varepsilon^{NUM}(p, \sigma_{ij})$ – это вычисленные значения деформации, полученные путем моделирования под той же нагрузкой в той же контрольной точке, N общее количество контрольных точек. Весовые коэффициенты w_i определяют «вес» каждой контрольной точки и выбираются исходя из параметров и исходных условий конкретной задачи (например, они могут быть связаны с важностью расположения контрольных точек).

В случае использования решений стохастического подхода в качестве значений деформаций можно использовать средние величины:

$$M = (\langle \varepsilon_i^{FBG}(F) \rangle - \langle \varepsilon_i^{NUM}(p, \sigma_{ij}) \rangle)^2. \quad (4.15)$$

Начальное значение вектора параметров p_0 соответствует некоторым первоначально предложенным значениям упругих констант. Для оценки приращения вектора параметров Δp по алгоритму Левенберга-Маркварда используется следующая формула:

$$\Delta p = (J^T W J + \lambda \text{Diag}[J^T W J])^{-1} J^T W (e^{FBG} - e^{FEM}). \quad (4.16)$$

Здесь $e^{FBG} = \{\varepsilon_1^{FBG}(F), \dots, \varepsilon_N^{FBG}(F)\}$, $e^{FEM} = \{\varepsilon_1^{FEM}(p, \sigma_{ij}), \dots, \varepsilon_N^{FEM}(p, \sigma_{ij})\}$, параметр λ контролирует скорость аппроксимации, $W = \text{Diag}[w_1, w_2, \dots, w_N]$ является диагональной матрицей для весовых коэффициентов, J является Якобианом с текущими значениями параметров p :

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varepsilon_1^{FEM}(p, \sigma_{ij}(F))}{\partial p_1} & \frac{\partial \varepsilon_1^{FEM}(p, \sigma_{ij}(F))}{\partial p_2} \\ \dots & \dots \\ \frac{\partial \varepsilon_N^{FEM}(p, \sigma_{ij}(F))}{\partial p_1} & \frac{\partial \varepsilon_N^{FEM}(p, \sigma_{ij}(F))}{\partial p_2} \end{bmatrix}.$$

В упругом случае достаточно знать только начальное и конечное значение приложенной нагрузки. Конечно-элементная модель должна

пересчитываться после каждого нового приращения вектора параметров Δp , так как каждое новое приближение упругих констант приведет к новому деформированному состоянию образца. Последующие аппроксимации вектора параметров уменьшат значение функции минимизации (рисунок 4.17).

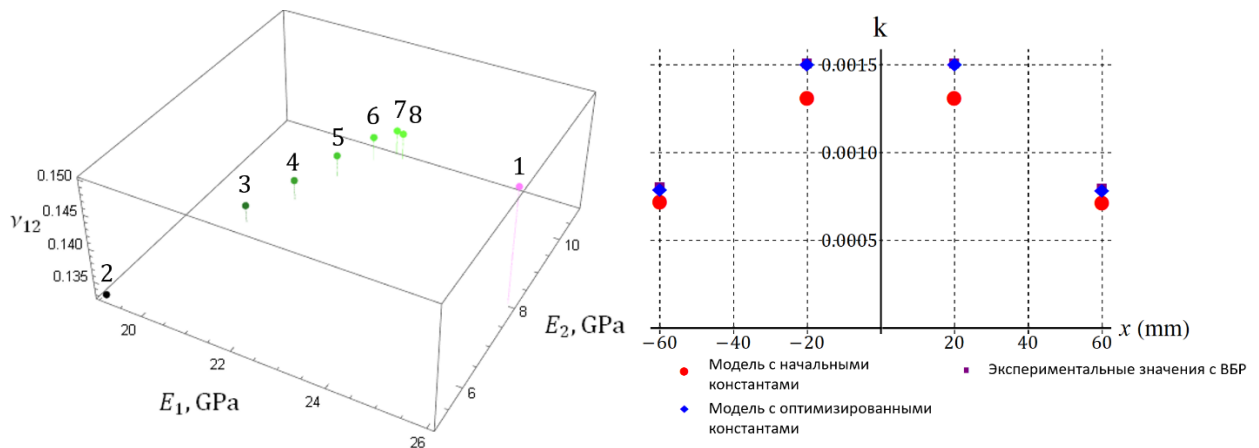


Рисунок 4.17 – Иллюстрация работы алгоритма уточнения упругих механических констант неоднородных сред на основе оптимизационного алгоритма

Ранее предполагалось, что измерения датчиков ВБР могут быть непосредственно преобразованы в значения деформации в направлении, соосном волокну. Однако относительное значение резонансной волны спектра, отраженной решеткой Брэгга, фактически зависит не только от коаксиальных деформаций, но и от других составляющих деформации, а также от изменения температуры оптического волокна в месте расположения решетки и температурных коэффициентов. В частности, деформации в поперечном направлении также способствуют изменению отраженного спектра и должны быть надлежащим образом учтены. В этом случае, вместо сравнения значений деформаций, можно минимизировать относительное значение резонансной волны отраженного спектра. Эти значения, как было показано ранее, зависят от оптических свойств волокна и двух составляющих тензора деформаций и могут быть восстановлены с помощью

смоделированных значений деформаций, как если бы они были реакцией волокна на некоторые окружающие среды с различными свойствами.

Если во время измерений температура является постоянной, то относительное значение отраженного спектра в местоположении датчика ВБР связано с компонентами тензора деформации ε_{ij} следующим образом [378]:

$$k = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = -\frac{n^2}{2}(p_{11} + p_{12})\varepsilon_{22} + \left(1 - \frac{n^2}{2}p_{12}\right)\varepsilon_{11}. \quad (4.17)$$

Аналогичные данные, которые преобразуются в коэффициент k с использованием значений деформации и констант оптического волокна, извлекаются из результатов моделирования. По разнице между экспериментально измеренными $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ и смоделированными значениями k в контрольных точках можно построить другой тип функции, который должен быть минимизирован:

$$M = \sum_{i=1}^N \frac{1}{w_i} \left(k_i^{FBG}(F) - k_i^{FEM}(p, \sigma_{ij}) \right)^2, \quad (4.18)$$

где $k_i^{FBG}(F)$ – относительное значение длины резонансной волны отраженного спектра, полученное экспериментально из ВБР в контрольной точке i для значения нагрузки F , $k_i^{FEM}(p, \sigma_{ij})$ вычисляется с использованием результатов моделирования при той же нагрузке F , что и при реконструкции уравнения (4.14). Эта модифицированная задача оптимизации приведет к более точным результатам, так как она учитывает большее количество физических параметров, влияющих на состояние датчика ВБР.

Этот подход может быть доработан для использования в случае трансверсально-изотропных сред. В условиях плосконапряженного состояния пять упругих констант ($E_1, E_2, \nu_{12}, G_{12}$ и G_{13}) определяют поведение поперечно изотропного материала. В связи с большим количеством констант требуется больше датчиков. Действительно, попытка решить задачу оптимизации с

помощью одного датчика ВБР приведет к потенциальной неоднозначности результатов, так как может быть несколько локальных минимумов с различным, иногда нефизическим, сочетанием параметров.

Предположим, что оптическое волокно направлено вдоль оси 1, 2-3 - это плоскость изотропии. Такая конфигурация позволяет оптимизировать осевые модули упругости. Задача состоит в том, чтобы найти такие значения вектора $p = \{E_1, E_2, \nu_{12}\}$, которые минимизируют функцию (4.18) и приводят результаты расчета $k_i^{FEM}(p, \sigma_{ij})$ в соответствие с экспериментальными значениями при заданной нагрузке. Поскольку мы рассматриваем ламинированные композиты, толщина одиночных слоёв в которых часто пренебрежимо мала, то в дальнейшем будут использоваться формулы плоско-напряженного состояния. Отношения между деформациями и напряжением в слое могут быть записаны в следующей форме:

$$\varepsilon_{11}^{FEM}(p, \sigma_{ij}) = \frac{\sigma_{11}}{E_1} - \frac{\nu_{12}\sigma_{22}}{E_1}, \quad (4.19)$$

$$\varepsilon_{22}^{FEM}(p, \sigma_{ij}) = -\frac{\nu_{12}\sigma_{11}}{E_1} + \frac{\sigma_{22}}{E_2}. \quad (4.20)$$

Функция регрессии принимает вид уравнения (4.11) и записывается с использованием составляющего соотношения для трансверсально-изотропных сред (в условиях плосконапряженного состояния):

$$k^{FEM}(p, \sigma_{ij}) = -\frac{n^2}{2}(p_{11} + p_{12})\left(-\frac{\nu_{12}\sigma_{11}}{E_1} + \frac{\sigma_{22}}{E_2}\right) + \left(1 - \frac{n^2}{2}p_{12}\right)\left(\frac{\sigma_{11}}{E_1} - \frac{\nu_{12}\sigma_{22}}{E_1}\right). \quad (4.21)$$

Задача оптимизации может быть решена с помощью метода L-M, как было описано в предыдущем параграфе. Приращение вектора параметра будет следующим:

$$\Delta p = (J^T W J + \lambda \text{Diag}[J^T W J])^{-1} J^T W (k^{FBG} - k^{FEM}), \quad (4.22)$$

где $\mathbf{k}^{FBG} = \{k_1^{FBG}(F), \dots, k_N^{FBG}(F)\}$, $\mathbf{k}^{FEM} = \{k_1^{FEM}(p, \sigma_{ij}), \dots, k_N^{FEM}(p, \sigma_{ij})\}$.

В случае трансверсально-изотропных свойств сред, при использовании одной волоконно-оптической линии с несколькими датчиками ВБР, все равно можно получить неверные результаты из-за падения в локальный минимум. Этого можно избежать, добавив несколько волоконно-оптических линий в ортогональном направлении друг к другу. Соответствующие компоненты, относящиеся к датчикам на второй линии, должны быть добавлены к векторам $\mathbf{k}^{FBG}$ и $\mathbf{k}^{FEM}$. Отношения (4.21) для этих компонентов должны быть переписаны с учетом трансляции системы координат.

Следует отметить, что в рамках данной методики измерения с помощью датчиков ВБР следует считать надежными с необходимой точностью. Данное направление исследований активно развивается в настоящее время, и несомненно, что последние теоретические и экспериментальные достижения будут способствовать повышению надежности датчиков ВБР как инструмента независимого неразрушающего контроля. Предложенный подход позволяет измерять упругие свойства в предположении об упругом поведении образца, когда существующие дефекты не растут. В подходе не проводится различие между типами производственных дефектов, влияющих на величины измеряемых деформаций, но ощущается общий эффект от любых структурных изменений через отклонение величин измеряемых деформаций от идеализированных модельных.

Оптимизация констант, как правило, требуется для композитных материалов или конструкций, где некоторые структурные изменения могут происходить по ряду причин, в основном связанных с производственными процессами. Эти изменения могут привести к разнице между свойствами, реализованными в конструкциях, и свойствами образцов, изготовленных из одного и того же материала и используемых для стандартных испытаний, проводимых для определения констант. Предложенный алгоритм обеспечит

упругие константы точного образца при наличии возникающих дефектов. Потенциальное преимущество представленного подхода заключается в том, что он позволяет проводить анализ констант материала даже для конструкций, которые находятся в процессе эксплуатации. Описанные задачи оптимизации подходят, как правило, для любого типа материала, единственное ограничение связано с технологической возможностью надежного крепления или встраивания оптического волокна.

Предлагаемый метод может быть также расширен для ортотропных материалов. В этом случае необходимо зарегистрировать большее количество составляющих тензора деформаций в контрольных точках, поэтому необходимо организовать различные формы расположения волоконно-оптических линий, которые позволяют получать значения деформаций в различных направлениях. Множественные оптоволоконные линии могут использоваться также при многоосных нагрузках, а также при определении свойств смещенных по оси слоёв. По своей природе датчик ВБР будет улавливать в основном деформации, соответствующие его собственной ориентации. Для того чтобы использовать разработанный алгоритм определения свойств внеосевых слоев, встроенное волокно должно быть ориентировано вдоль этих слоев.

Более сложное механическое поведение материала, в том числе нелинейность матрицы, может быть решено путем включения иерархических многомасштабных моделей, решающих задачи локализации с целью преобразования макроскопических напряжений в условия нагружения для микроуровневой модели, при которых матрица и включения могут быть различимы. Реакцию каждого из составляющих можно смоделировать отдельно, используя, например, нелинейную модель для матрицы. Используя методы гомогенизации, характеристики макромасштабного эффективного поведения могут быть пересчитаны и использованы в предложенной задаче

оптимизации. Такое расширение подхода является предметом дальнейших исследований. Представленные в разделе результаты опубликованы в работах [117, 142].

Таким образом, в главе 4 представлен подход для расчета распределений локальных полей напряжений и деформаций в неоднородных средах. Параметры распределений определяются из статистических моментов, выражения для которых были получены с помощью решения стохастических краевых задач и многоточечных моментных функций высокого порядка. Основываясь на статистиках высокого порядка, восстановленные законы параметрического распределения позволяют учитывать влияние сложных микроструктурных геометрических особенностей и пространственного расположения фаз в представительном объеме.

Для целей верификации было проведено сравнение результатов стохастического подхода и конечно-элементного моделирования для двух примеров, в которых изучались двухфазные модели двунепрерывной неоднородной микроструктуры с разной объемной долей. Наблюдалось хорошее соответствие между полученными распределениями при стохастическом подходе и анализе методом конечных элементов. Полученные результаты демонстрируют возможность применения разработанного стохастического подхода к определению морфологии реальных образцов материалов без необходимости упрощения их геометрических характеристик и выполнения задач дискретизации. Предложены экспериментальные подходы для верификации результатов стохастического моделирования на основе распределенных данных о регистрируемых деформациях.

ГЛАВА 5. Влияние морфологических характеристик на закономерности деформирования неоднородных структур

Для применения стохастических подходов к анализу механического отклика в неоднородных средах необходимо изучить влияние разнообразных морфологических параметров на используемые инструменты структурные дескрипторы, а также на получаемые на их основе статистические характеристики полей напряжений и деформаций. Те или иные изменения в структурной морфологии будут по-разному сказываться на характере распределений, получаемых как показано в главе 3, и, следовательно, требуют различной точности получаемых решений.

В данной главе приводятся некоторые результаты исследования зависимости механических свойств различных неоднородных сред от вариации их характерных внутренних морфологических параметров. Так, для пористых структур рассматривается влияние изменений морфологических характеристик, таких как форма и распределение пор по размерам, а также наличие концентраторов напряжений в виде одиночных и множественных крупных пор. Также изучается влияние размера представительного объема на точность численного прогнозирования упругих свойств. Кроме того, на примере акрилонитрил-бутадиен-стирола, армированного короткими волокнами, изучается влияние изменений микроструктурных параметров, таких как длина волокон, угол их ориентации, а также их кластеризация, на распределения внутренних напряжений при макронагрузении.

Деформационное поведение представительных объемов структур с различными морфологическими характеристиками было изучено с использованием статистических распределений напряжений, полученных на основе конечно-элементного анализа. С использованием полученных результатов был проведен анализ возможности использования

инструментария многоточечного статистического подхода для учета тех или иных особенностей влияния морфологии на локализацию механического поведения.

5.1. Взаимосвязь морфологии микроструктуры и распределения напряжений в пористых структурах с замкнутыми порами

Твердые тела с пористой структурой представляют собой особый класс композиционных материалов и, благодаря своим структурным особенностям, широко используются в различных инженерных областях. Например, поры в керамике расширяют ее функциональные возможности, особенно в энергетике и экологии [383]. Керамические, а также металлические пенопласты используются в качестве фильтров для снижения токсичности выхлопных газов автомобилей [384]. Металлические пенопласты легкие, негорючие, нетоксичные, а также хорошо поглощают вибрацию и звук. Благодаря ячеистой структуре их механические характеристики могут существенно отличаться от характеристик обычных металлических материалов [385–388]. Другие пористые материалы, например, пенобетон, часто используются в строительстве для достижения звуко- и теплоизоляции [389], в тоже время пористый кремний является перспективным материалом для акустических преобразователей [390].

В общем случае пористые среды можно разделить на открытопористые и закрытопористые. Существует также классификация по геометрическим признакам на регулярные пористые структуры, в которых поры расположены в определенном порядке, и стохастические структуры, в которых форма, размеры пор, их ориентация и взаимное расположение случайны.

Модели представительных объемов микроструктуры традиционных материалов, основанные на экспериментальных данных, могут учитывать только некоторые особенности их морфологии или представлять структуру

конкретного образца. Следовательно, проверка теоретических предсказаний для различных морфологических эффектов на механическое поведение материалов осложнена, поскольку изменение параметров искусственных моделей представительных объемов довольно сложно воспроизвести в реальных материалах.

Представительные объемы пористых сред понимаются как статистические реализации микроструктуры со случайным распределением морфологических параметров. Это особенно важно для объектов с малыми размерами, например биологических тканей, где размеры «классического» представительного объема материала могут превышать размеры всего образца. Статистический подход делает возможным выявление нетипичных реализаций микроструктуры, механическое поведение которых существенно отличается от среднего и может определяющим образом влиять на процессы локализации, такие как зарождение и распространение трещин.

Всего было рассмотрено шесть отдельных сценариев (обозначенных буквами от А до Е) геометрических конфигураций внутренней морфологии пористых структур. В таблице 5.1 представлена информация об изменении основных морфологических характеристик соответствующих структур.

Таблица 5.1 – Параметры анализируемых моделей пористых сред

Иssl.	Признак	Форма включений	Размер включений	Размер автодома	Количество включений	Объемная доля включений
А	Изменение размера представительного объема	И	И, Н	И	И	Н
Б	Изменение формы	И	Н	Н	И	Н
В	Изменение формы включения при фиксированном максимальном объеме	И	И	Н	И	Н
Г	Изменение размера включений	Н	И	Н	И	Н
Д	Множественные крупные поры	Н	И	Н	И	Н
Е	Изменение размерного параметра в структурах с одиночными крупными порами	Н	И	Н	И	Н

* Н – неизменный, И – изменяющийся.

Для анализа влияния размера представительного объема на расчетные морфологические и механические свойства (исследование А) были созданы модели с различным размером стороны кубической ячейки от 5 мм до 30 мм (рисунок 5.1). С увеличением объема количество включений возрастало от $N=4$ (модель S-A1) до $N=663$ (модель S-A6).

А

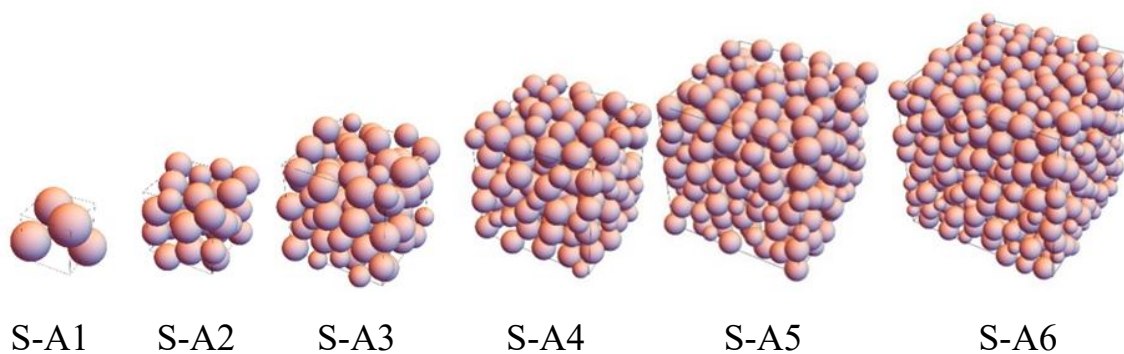


Рисунок 5.1 – Структуры со сферическим включением с различными размерами кубического представительного объема (исследование А)

В исследованиях *Б* и *В* – рассматривались включения в форме тетраэдра, октаэдра, куба, икосаэдра и сферы. Эти формы были выбраны по принципу возрастания числа углов, то есть перехода от остроугольных объектов к сферам. В исследовании *Б* размер включения определялся максимальным радиусом сферы, описанной около каждого включения. Этот радиус представлял собой случайную величину, равномерно распределенную между 0.25 и 1.5 мм. Разброс числа включений для таких структур составлял от 62 до 179. Примеры таких структур приведены на рисунке 5.2. В исследовании *В* объем каждого включения был равен объему эквивалентного сферического включения, радиус которого был равномерно распределен в диапазоне от 0.25 до 1 мм.

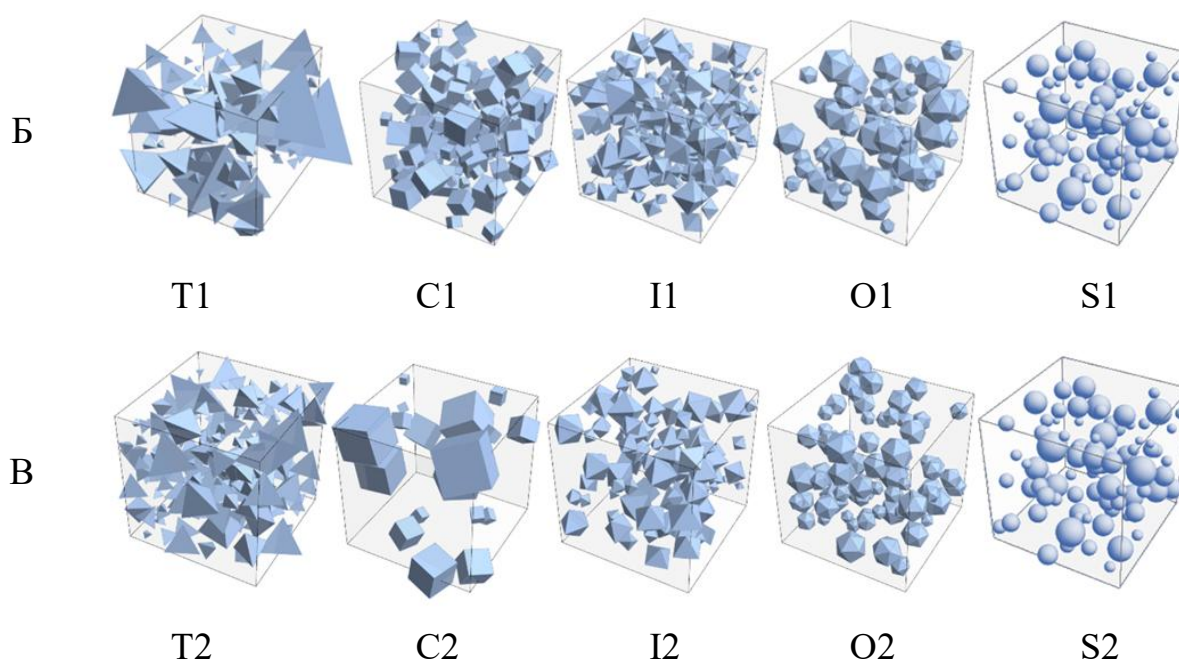


Рисунок 5.2 – Представительные объемы с различной формой: исследование *Б* с одинаковой дисперсией радиуса включения; исследование *В* с одинаковым объемом включения

В исследовании *В* рассматривались структуры со сферическими включениями с фиксированным минимальным радиусом $r_{max} = 0.75, 1$ и 1.5 мм для моделей S-R1, S-R2 и S-R3 соответственно (рисунок 5.3). Количество включений в структурах составляло от 60 до 470 при неизменном уровне пористости.

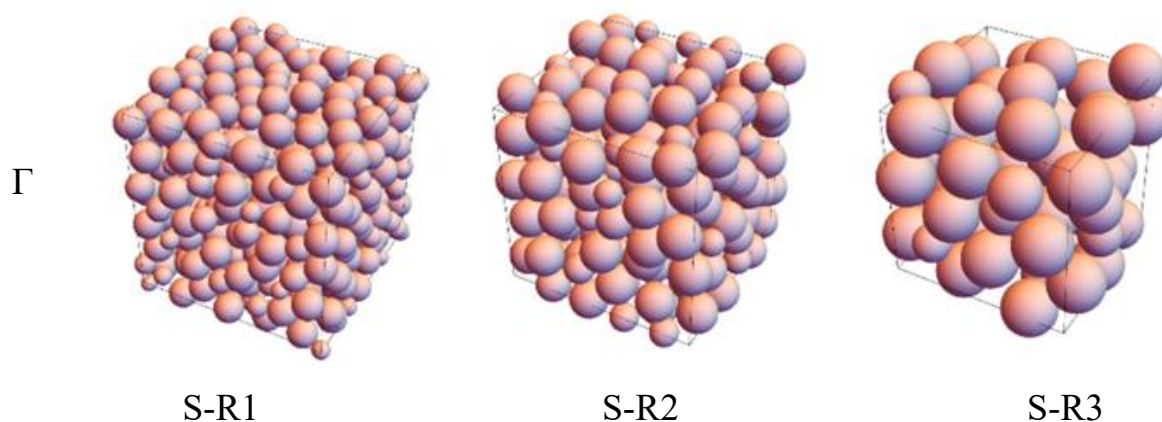


Рисунок 5.3 – Структуры со сферическим включением с различными размерами включений (исследование *Г*)

Исследование D изменения анизотропии эффективных механических свойств за счет непропорционально больших неоднородностей проводилось на основе моделей, содержащих сферы с увеличенным радиусом (рисунок 5.4). Также рассматривался случай структур (исследование E) с одним концентратором, радиус которого на коэффициент k больше максимального радиуса остальных включений. Исследовались три различных значения параметра k при фиксированных остальных параметрах (рисунок 5.4). С увеличением параметра k общее количество включений уменьшалось, так для SS-K1 $N=405$, а для SS-K3 $N=181$.

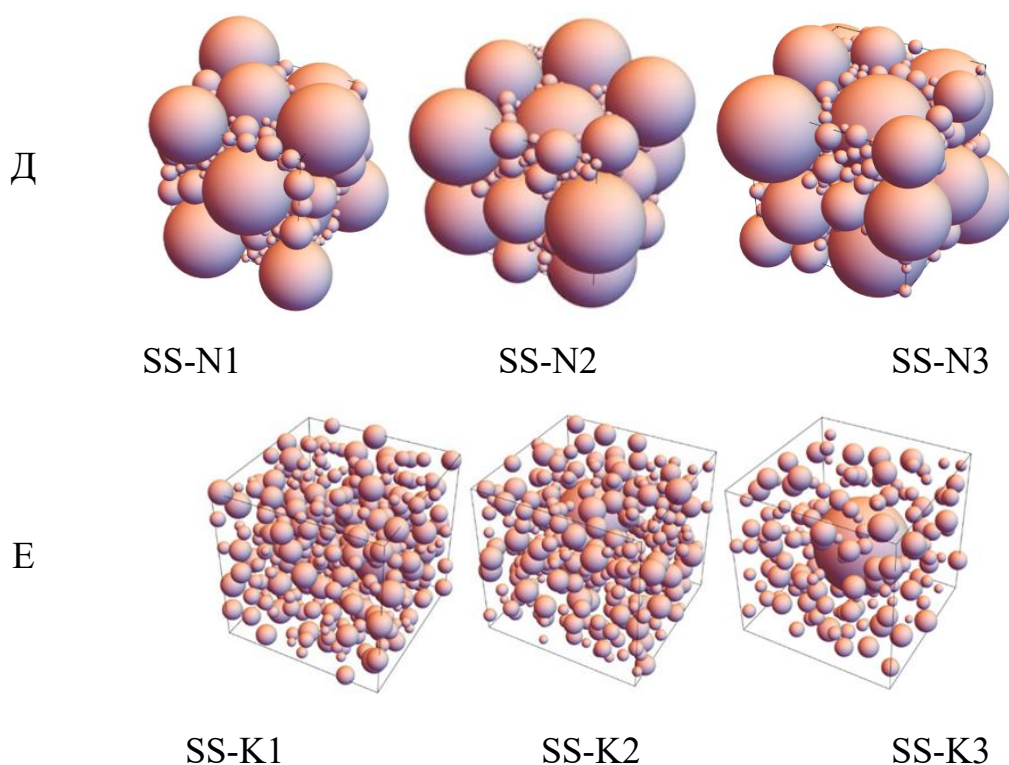


Рисунок 5.4 – Структуры с множеством крупных пор (исследование D) и с одной крупной порой (исследование E)

Морфологические характеристики каждой модели исследовались с помощью многоточечных моментных функций, которые оценивают взаимное влияние точек, расположенных на разных расстояниях друг от друга. Для моделирования механического поведения представительных объемов и

оценки их упругих свойств использовался метод конечных элементов. Тетраэдрические КЭ-модели были созданы в системе Wolfram Mathematica на основе разработанного программного алгоритма [156, 161, 162].

Расчеты проводились в программе SIMULIA Abaqus Standard с элементами типа C3D4. Были заданы следующие модельные свойства высокопрочного полистирола: модуль Юнга $E = 2080$ МПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0.35$. Для исследованных структур были получены статистические распределения минимальных главных напряжений, вызванных сжимающей нагрузкой. Ниже представлены результаты исследований по оценке влияния морфологических параметров включений на упругие свойства конструкций.

Напряжения в конечных элементах можно рассматривать как реализацию случайной переменной, имеющей некоторые статистические распределения. Таким образом, принимая значение поля напряжений в каждом элементе, а также объем элемента, можно решить обратную задачу восстановления этих распределений. Состояние напряжений всей модели можно выразить в виде гистограмм, где столбцы указывают вероятность нахождения значения напряжения в элементе в пределах диапазона, соответствующего столбцу. Эти гистограммы позволяют оценить относительную долю конечных элементов, в которых напряжения (или инварианты напряжений) превышают определенные пределы. Например, если образцы подвергаются растягивающей нагрузке и предполагается хрупкое поведение материала, особое внимание следует уделить максимальному главному напряжению. Критическое значение напряжений может быть использовано в качестве порога для распределений плотности вероятности, что указывает на относительное количество элементов, которые разрушаются под заданной растягивающей нагрузкой.

Гистограммы функции плотности вероятности минимальных главных напряжений для исследования *A* представлены на рисунке 5.5. С увеличением стороны представительного объема доля конечных элементов с высокими сжимающими напряжениями уменьшалась. Функция плотности вероятности, соответствующая структуре S-A6, была выше остальных и имела вид, близкий к нормальному распределению, в то время как функция для S-A1 имела ярко выраженную асимметрию из-за большего значения напряжений в элементах при равных нагрузках. Графики функций плотности вероятности, соответствующие структурам S-A4, S-A5 и S-A6, имели вид, близкий к асимметричному нормальному распределению. Структуры с постоянными размерами включений (как сферические, так и кубические) имели характер распределения значений минимальных главных напряжений, близкие к нормальному.

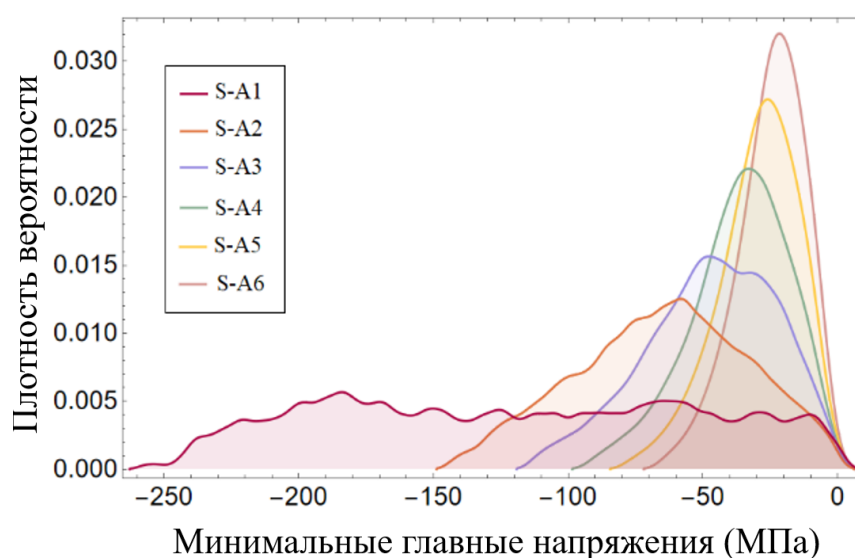


Рисунок 5.5 – Распределение плотности вероятности минимальных главных напряжений для моделей представительного объема с различным размером (исследование *A*)

На рисунке 5.6 представлены моментные функции второго и четвертого порядков, полученные для структур T1, C1, I1, O1 и S1 с одинаковой объемной долей 15% (исследование *Б*).

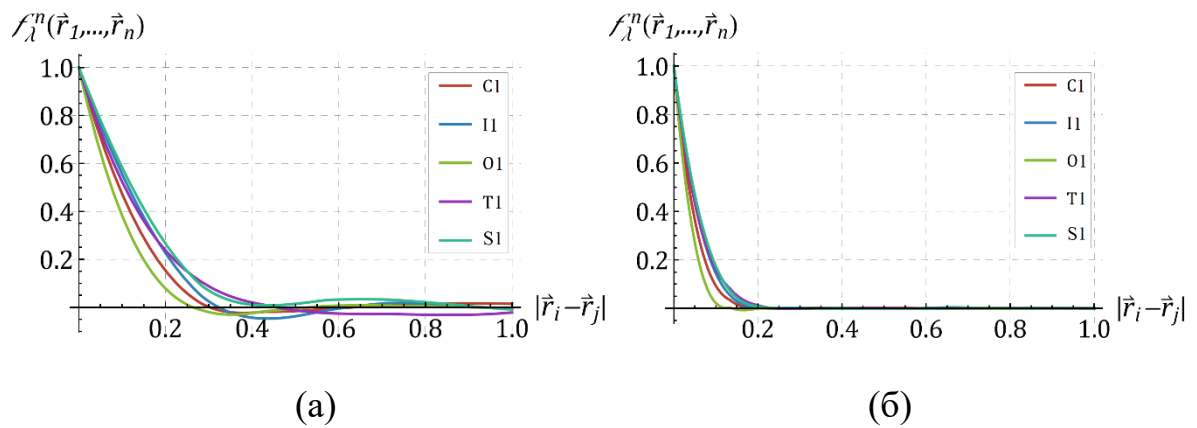


Рисунок 5.6 – Нормализованные моментные функции второго (а) и четвертого (б) порядков для структур T1, O1, C1, I1 и S1

Различия в графиках моментных функций для большинства этих структур свидетельствуют о том, что на их общие морфологические свойства в основном влияла не форма включений, а их количество: чем больше включений в объеме, тем выше положение соответствующей функции на графике. Форма включений не оказывает решающего влияния на эффективные свойства материала, однако она модифицирует морфологию среды, формируя дополнительные концентраторы напряжений, способные инициировать процессы разрушения. Это подтверждается функциями распределения вероятностей минимальных главных напряжений, полученными с использованием конечно-элементного анализа (рисунок 5.7). Указанные функции упорядочены в соответствии с возрастанием эффективного модуля упругости рассматриваемых структур. Так как исследовалось сжимающее нагружение, более выраженные концентраторы напряжений соответствуют меньшим значениям главных напряжений.

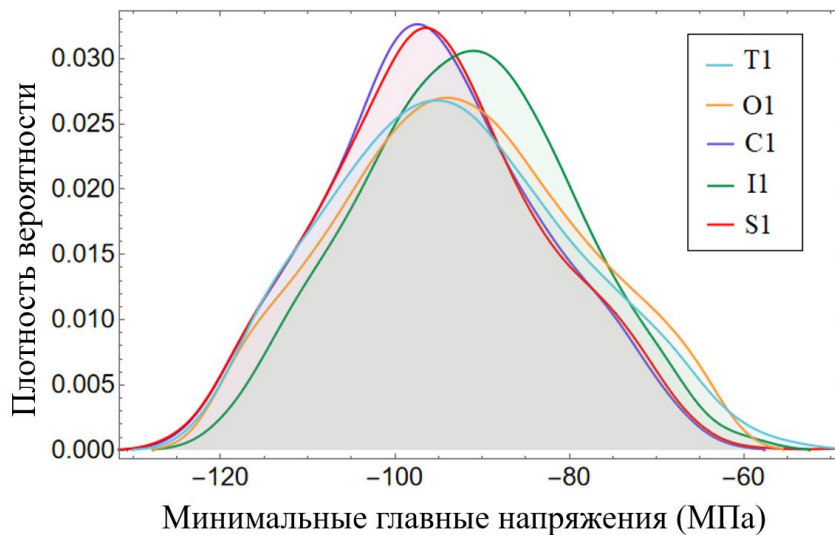


Рисунок 5.7 – Распределение плотности вероятности минимальных главных напряжений для структур T1, O1, C1, I1 и S1 (исследование B)

Форма включений оказывала заметное влияние на распределения напряжений: структура T1 с порами, имеющими острые углы, характеризовалась повышением в правой части распределения и снижением в средней области, тогда как для структуры S1 наблюдалась противоположная тенденция — спад в правой части и подъем в середине. Это свидетельствует о том, что поры тетраэдрической, кубической и октаэдрической формы в целом формируют больше зон с высокой интенсивностью напряжений по сравнению со структурами с более сглаженной формой пор, такими как икосаэдры и сферы. Дополнительным подтверждением служит сходство распределений, полученных для структур S1 и C1.

Рассматривались также структуры с включениями различной формы, максимальный размер которых соответствовал объёму сферы радиусом 1 мм (исследование B). Минимальный радиус описанной сферы составлял 0.25 мм. Количество включений в структурах различалось. Графики моментных функций второго и четвертого порядков, полученные для представительных

объемов T2, O2, C2, I2 и S2 с одинаковой объемной долей $p = 0.10$, приведены на рисунке 5.8.

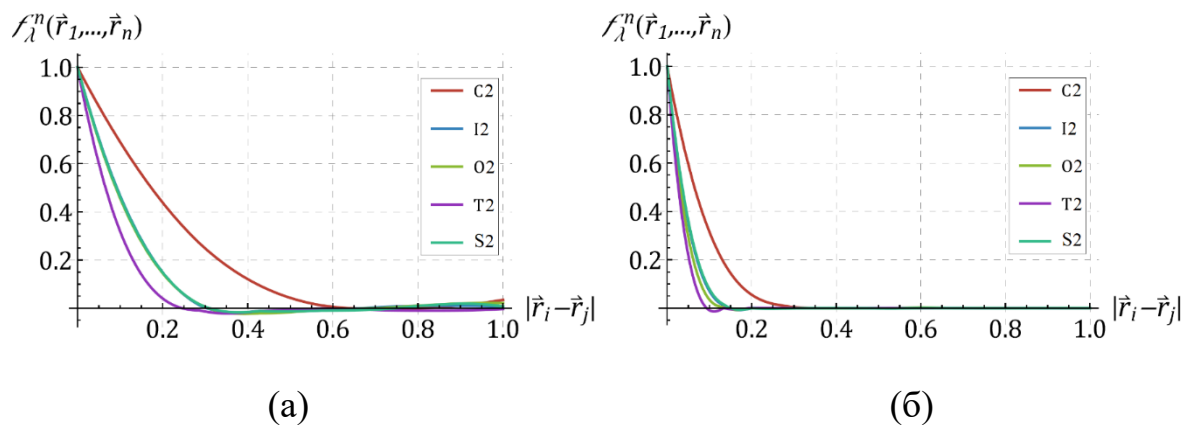


Рисунок 5.8 – Нормированные моментные функции второго (а) и четвертого (б) порядка для структур T2, O2, C2, I2 и S2

Аналогично результатам исследования B , графики моментных функций были упорядочены в соответствии с количеством включений в представительном объеме, что указывает на более существенное влияние числа и случайности расположения включений по сравнению с их формой. Функции распределения минимальных главных напряжений показали, что каждая структура характеризуется собственным диапазоном напряжений, возникающих при одном и том же внешнем нагружении (рисунок 5.9). Наибольшие доли с высокими абсолютными значениями главных напряжений были зафиксированы для структур C2 и S2. При этом большинство концентраторов напряжений формировалось в областях между соседними включениями.

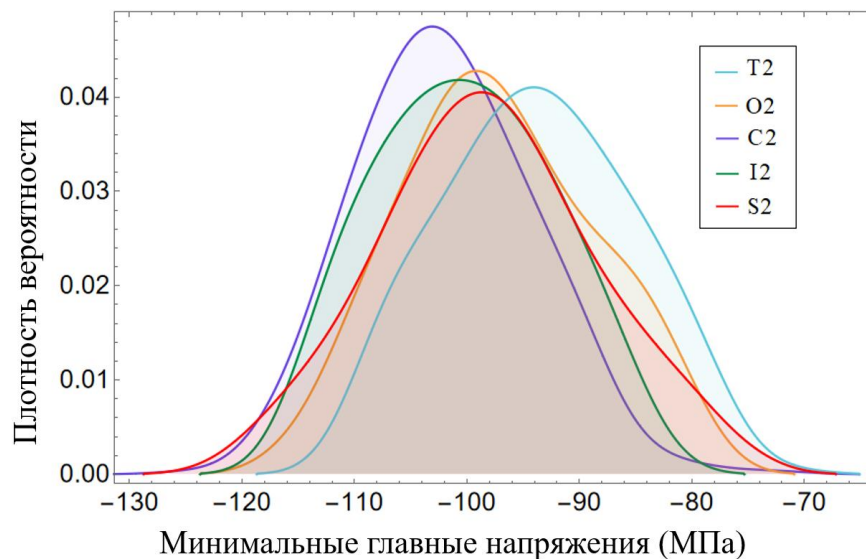


Рисунок 5.9 – Распределение плотности вероятности минимальных главных напряжений для структур T2, O2, C2, I2 и S2 (исследование B)

Для исследования влияния изменения размеров включений на эффективные свойства были смоделированы несколько структур со сферическими включениями (исследование Г). Минимальный радиус включений был постоянным и составлял 0.25 мм, а максимальный радиус варьировался и для разных структур составлял 0.75 мм, 1 мм и 1.5 мм. Объемная доля в этих структурах имела фиксированное значение $p = 0.5$. Различия в морфологических характеристиках для таких структур наиболее ярко проявляются на моментные функции четвертого порядка (рисунок 5.10). На эти характеристики в большей степени повлиял разброс размеров включений, чем случайность их расположения - в каждом случае кривые для структур с одинаковым интервалом распределения радиусов практически совпадали.

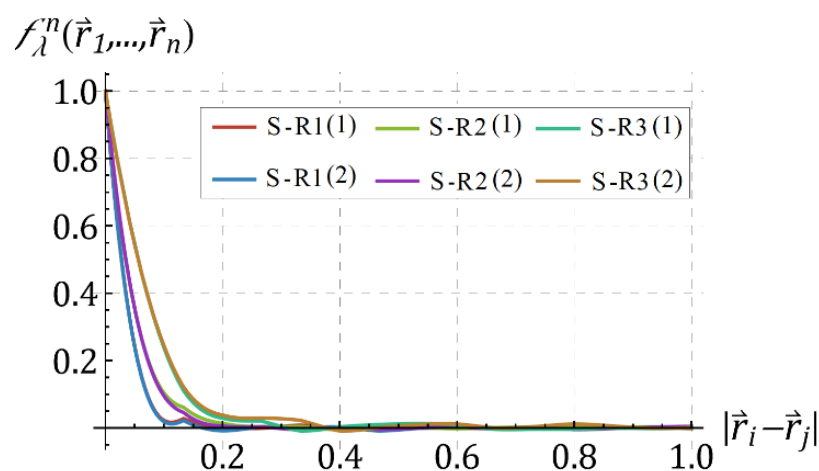


Рисунок 5.10 – Нормированные моментные функции четвертого порядка для структур S-R1, S-R2 и S-R3 (для каждого типа структуры рассмотрено два варианта реализации)

Гистограммы, построенные для структур S-R1 и S-R2, были похожи, в то время как функция, соответствующая структурам S-R3, отклонялась от них (рисунок 5.11). Очевидно также, что диапазон напряжений, соответствующий реакции структуры S-R3 на сжимающую нагрузку, шире, чем у двух других структур.

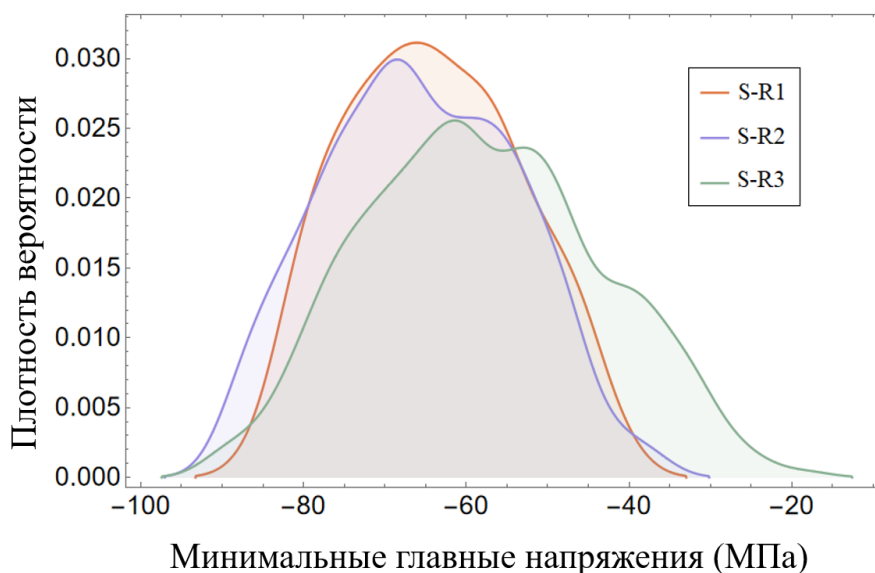


Рисунок 5.11 – Распределение плотности вероятности минимальных главных напряжений для структур S-R1, S-R2 и S-R3 (исследование Γ)

Целью двух последующих исследований (*Д* и *Е*) являлась демонстрация потенциального эффекта анизотропии в структурах, рассматриваемых как статистические реализации микроструктуры с широким распределением размеров включений. При фиксированной объемной доле заданные параметры распределения могут приводить к формированию структур с непропорционально крупными включениями. Так, в отдельных статистических реализациях небольшое число включений при их относительно больших размерах может вызывать потерю изотропии.

В исследовании *Д* были рассмотрены три модели с множеством крупных пор с высокой объемной долей пор ($p = 0.8$). Для этих структур моментные функции четвертого порядка, реагирующие в первую очередь на размер включений, фактически совпали, так как распределение размера включений для этих трех структур осталось неизменным (рисунок 5.12).

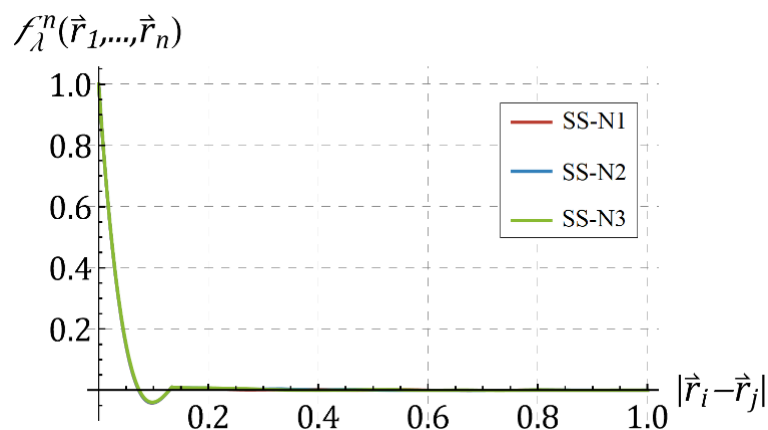


Рисунок 5.12 – Нормализованные моментные функции четвертого порядка для структур SS-N1, SS-N2 и SS-N3.

Для всех трех вариантов структур с множественными концентраторами (исследование *Д*) графики плотности вероятности минимальных главных напряжений, полученные для нагружения в разных направлениях, отличались незначительно (рисунок 5.13). Их пик соответствовал значениям, близким к нулю, что можно объяснить наличием в зонах укрупненных включений

множественных концентраторов напряжений, разгружающих прилегающие участки.

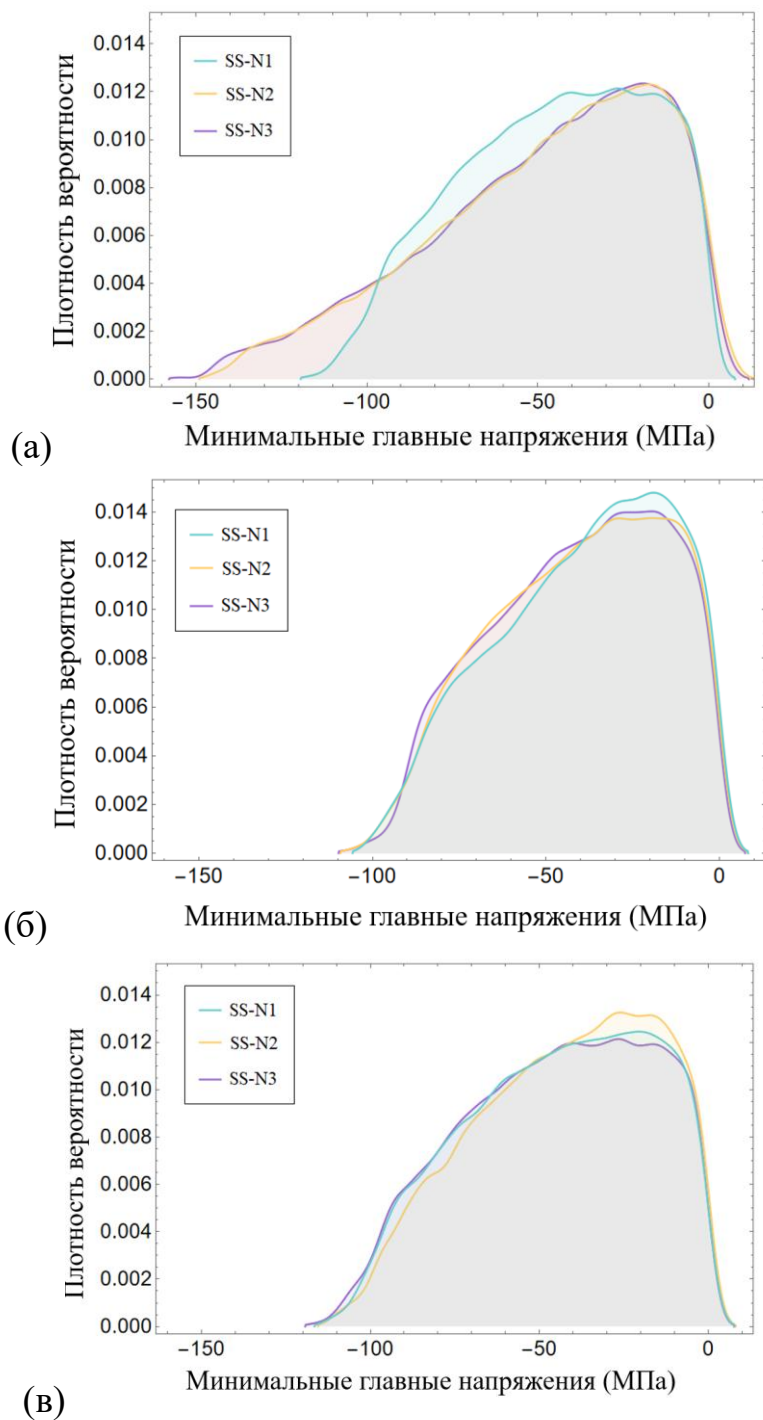


Рисунок 5.13 – Распределение плотности вероятности минимальных главных напряжений для структур SS-N1, SS-N2 и SS-N3 для различных направлений нагружения: вдоль оси X (а), Y (б) и Z (в)

Структуры в исследовании E содержали одно укрупненное включение с размером, значительно превышающим средний размер остальных включений в группе, концентратор в виде сферы с радиусом, в k раз превышающим максимальный радиус всех остальных включений. Модели создавались при значениях $k = 2, 3$ и 4 и объемной доле $p = 0.2$. В отличие от предыдущего примера с множественными включениями, здесь наблюдается явное влияние одного концентратора на морфологические характеристики структур. Кривые для моментных функций лежат в порядке убывания в зависимости от величины k (рисунок 5.14).

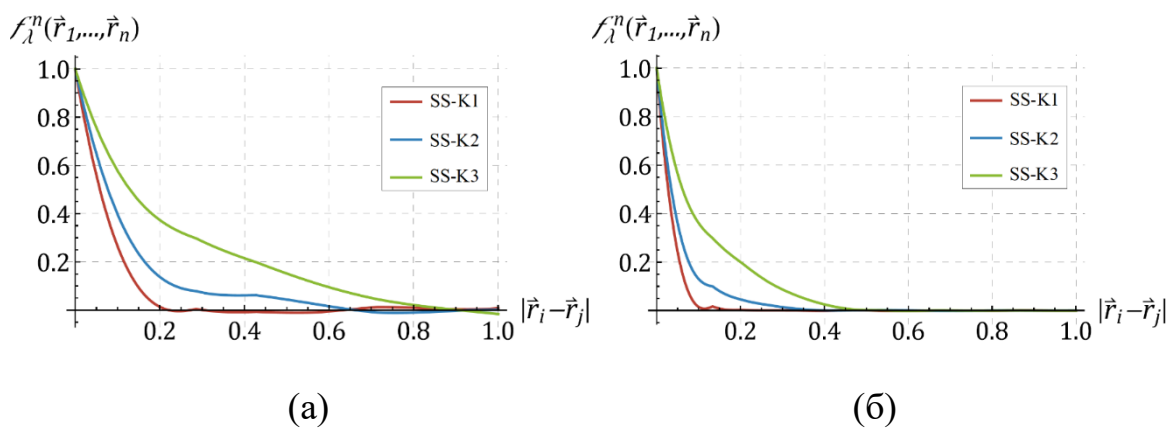
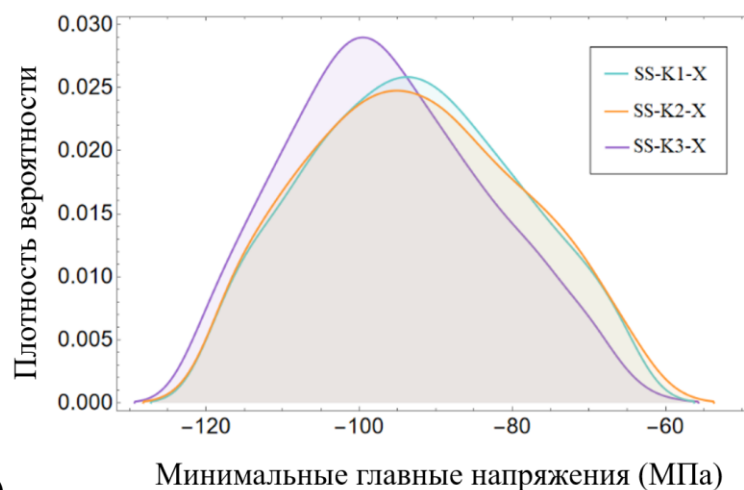
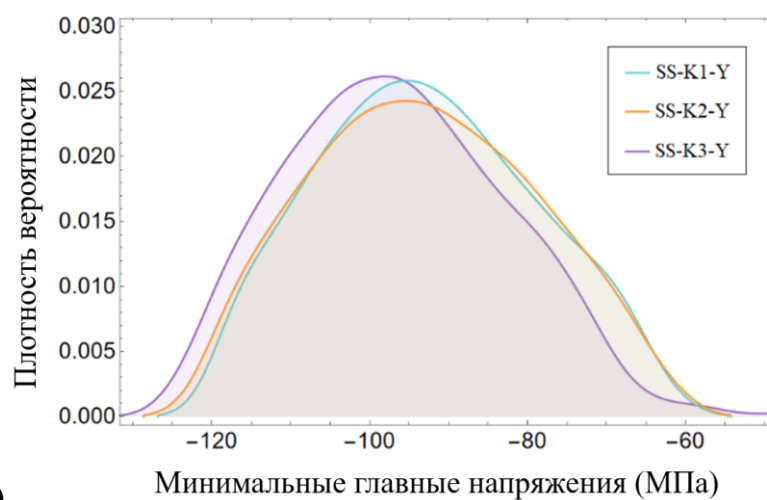


Рисунок 5.14 – Нормированные моментные функции второго (а) и четвертого (б) порядка для структур SS-K1, SS-K2 и SS-K3

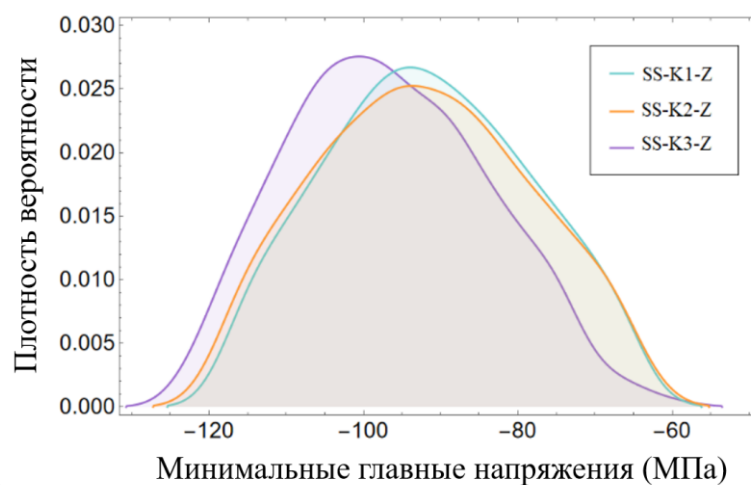
Для структур SS-K1 и SS-K2 плотность вероятности, полученная для нагрузки вдоль оси Z , несколько отличалась от плотности вероятности для двух других направлений (рисунок 5.15). При увеличении коэффициента k до 4 графики для всех трех направлений имели различные формы плотности вероятности минимальных главных напряжений. При сравнении структур с разными значениями k для одного и того же направления нагружения в них наблюдаются разные доли высоких сжимающих напряжений.



(а)



(б)



(в)

Рисунок 5.15 – Распределение плотности вероятности минимальных главных напряжений для SS-K1, SS-K2 и SS-K3 для нагружения в различных направлениях: вдоль осей X (а), Y (б) и Z (в)

Таким образом, влияние концентраторов напряжений на распределение напряжений уменьшалось с ростом размера представительного объема. Установлено, что дополнительные концентраторы напряжений, образуемые остроугольными включениями, могут влиять на инициирование процессов разрушения в пористых материалах. В противоположность этому, сглаженные формы (сфера, икосаэдр) обеспечивают более равномерное напряженное состояние. Установлено, что моментные функции второго и четвертого порядка для структур с постоянной объемной долей не зависят от формы пор, но чувствительны к количеству включений; также наблюдается слабая зависимость эффективных свойств таких структур от последнего фактора.

Изменение распределения размеров включений для структур с постоянной объемной долей не оказало существенного влияния как на их общее напряженное состояние. Тем не менее, наблюдалось влияние изменения размера включений на морфологические свойства этих структур. Исследование структур с множественными крупными включениями показало, что анизотропия упругих свойств может быть индуцирована расположением аномально крупных включений, при этом морфологические отличия отсутствовали. Наличие одного крупного включения влияло на изотропию упругих характеристик моделей и приводило к появлению случайно расположенных концентраторов напряжений, которые, очевидно, влияли на распределение напряжений и могли запустить процесс раннего разрушения.

В целом, полученные результаты подтвердили, что надежное описание механического поведения пористых материалов возможно только при комплексном учете совокупности морфологических факторов — формы, размеров, распределения и концентрации пор. Для практических расчетов важно учитывать статистический разброс морфологии, так как отдельные атипичные реализации структуры могут радикально изменить локальное напряженное состояние. Полученные зависимости, связывающие характеристики внутренней структуры с механическим поведением и

свойствами среды, могут быть использованы, в частности, при разработке алгоритмов машинного обучения, позволяющих оценивать механическое поведение структур на основе данных о морфологии их микроструктуры.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в статье [126].

5.2. Морфология микроструктуры и механические свойства 3D-печатных композитов, армированных короткими волокнами

Для изучения влияния морфологических параметров в двухфазных композитах с включениями в виде коротких волокон были исследованы композиты на основе матрицы из полимера АБС. Материал армировался короткими волокнами трех типов: углеродными (УВ), стеклянными (СВ) и базальтовыми (БВ). Для получения информации о внутренней структуре композитов были изучены коммерчески доступные филаменты для аддитивного производства диаметром 1,75 мм.

Исследование влияния параметров микроструктуры проводилось численно на основе анализа представительных объёмов армированных материалов. Для изучения внутренней структуры исследуемых композитов проводилось томографическое сканирование образцов филамента с использованием микротомографа SkyScan 1272 Bruker. Для создания геометрических моделей представительных объёмов материалов с измененными морфологическими параметрами использовался метод последовательной случайной адсорбции [391]. Расположение волокон в образцах подчинялось закону равномерного распределения. Рассматриваемые волокна имели цилиндрическую форму и не пересекались друг с другом.

Каждый представительный объём дискретизировался с использованием восьмиузловых гексаэдральных элементов в Wolfram Mathematica, после чего через разработанный программный модуль [155, 165] модель передавалась в

SIMULIA Abaqus (тип элемента C3D8). Характерный размер воксельного элемента устанавливался равным 1/4 диаметра волокна. Предполагалось, что деформация модели происходит в упругой области. Эффективный модуль упругости полимера АБС был получен на основе собственных экспериментов с образцами филамента. Значения модулей упругости, распределения и коэффициента Пуассона для армирующих волокон были взяты из литературы (таблица 5.2).

Таблица 5.2 – Механические свойства матричных и волокнистых материалов

Материал	Упругий модуль, ГПа	Коэф. Пуассона	Источник
АБС	1.59	0.39	Собственный эксперимент
УВ	230	0.35	[392]
СВ	72	0.22	[393]
БВ	90	0.23	[394]

Материал как матрицы, так и всех типов волокон предполагался изотропным. Для расчёта эффективных свойств к верхней поверхности моделей прикладывалась нагрузка на растяжение, соответствующая 1% деформации. Граничные условия задавались ограничением перемещений вдоль оси Z и фиксацией всех трёх степеней свободы вращения для узлов на нижней поверхности, а также ограничением перемещений для двух узлов в углах: одного — вдоль оси Y, другого — вдоль осей X и Y. Направление Z совпадало с субвертикальной ориентацией волокон. Аналогичные условия задавались при нагружении вдоль двух других направлений.

Полученные наборы рентгеновских сечений для каждого образца были использованы для стереологических реконструкций и визуализации трёхмерных моделей волокнистой структуры образцов. На рисунке 5.16

представлена реконструированная 3D-модель волокнистой структуры образца филамента, а также изображения вытянутых волокон в образцах после разрушения. Структура филамента характеризовалась плотным, равномерным субвертикальным расположением волокон по всему объёму. Объёмная доля волокон в филаменте, оценённая по 3D-модели, составила 2,92% для АБС+УВ, 3,52% для АБС+СВ и 3,98% для АБС+БВ.

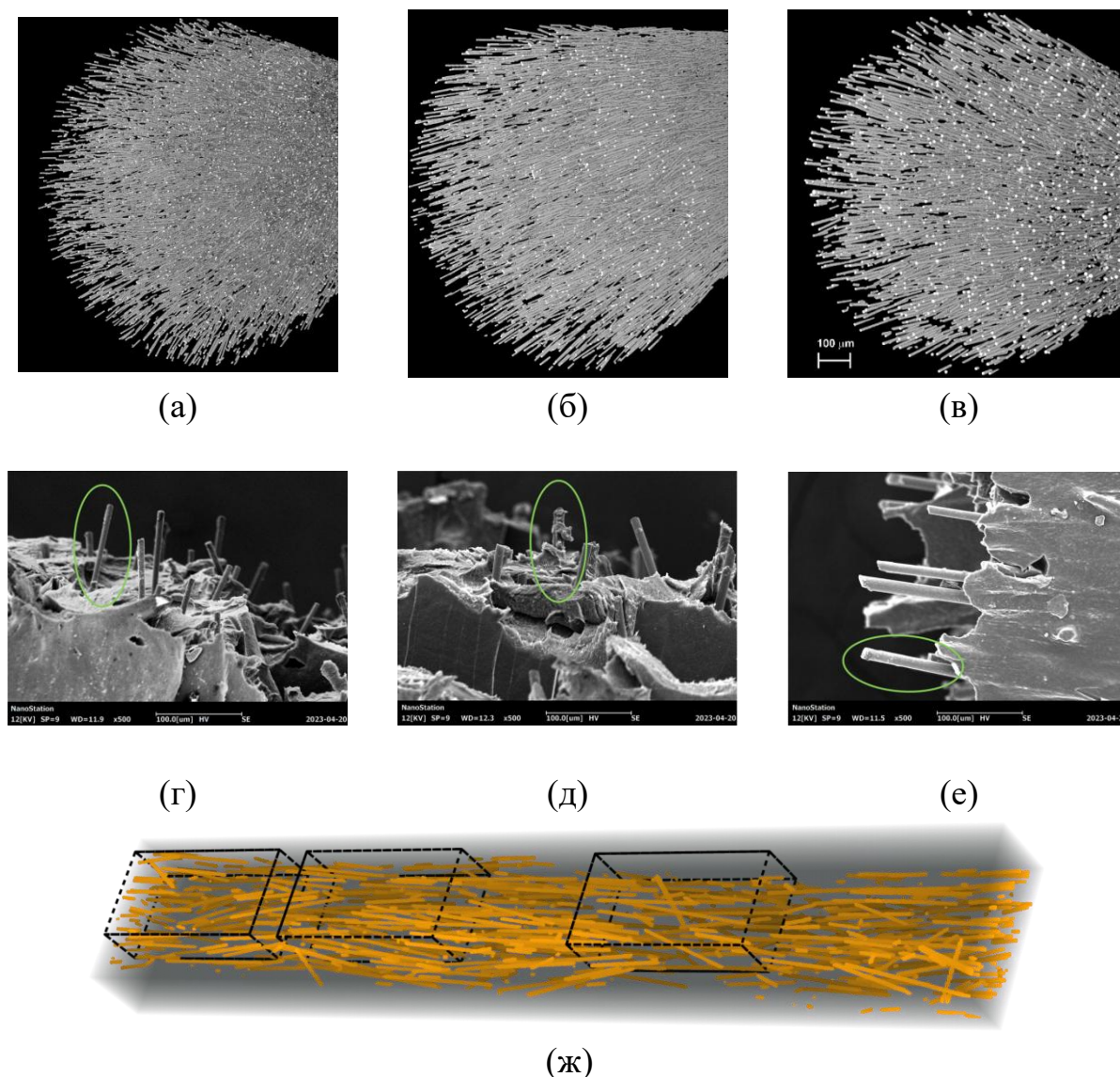
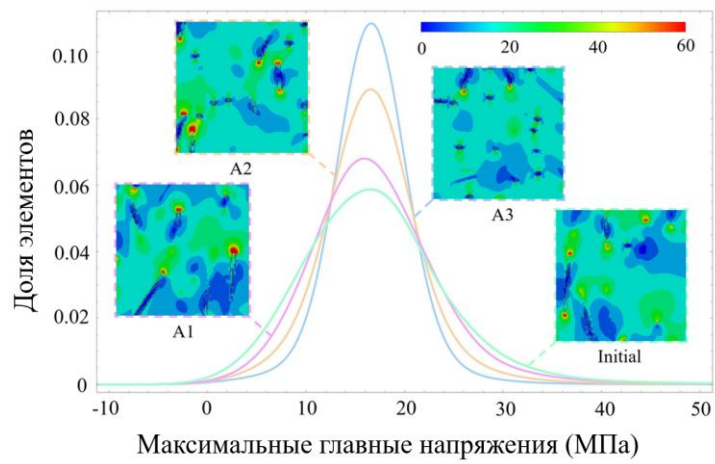


Рисунок 5.16 – Общий вид 3D-модели структуры армированного филамента: (а) АБС+УВ, (б) АБС+СВ, (в) АБС+БВ; СЭМ изображения вытянутых в процессе разрушения волокон: (г) АБС+УВ, (д) АБС+СВ, (е) АБС+БВ; (ж) воксельная модель наполненного филамента с выделенными представительными объемами

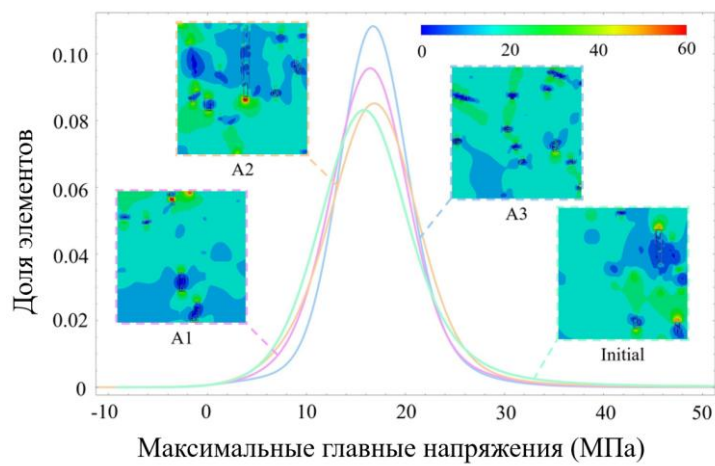
На основе компьютерной томографии были получены дискретные значения углов ориентации и длин волокон в виде гистограмм, отображающих распределение волокон (от общего числа волокон в модели), где длина (или угол ориентации) соответствует значению по оси X. Для анализа влияния изменения геометрических параметров композитов на механический отклик рассматривались модели с модифицированной длиной волокон и их ориентацией. Варьирование геометрических параметров осуществлялось путём изменения параметров логнормального распределения. При этом изменялся только один параметр, а остальные принимались в соответствии с исходной моделью. Например, при рассмотрении вариации угла ориентации распределение длины волокон, их объёмная доля и закон распределения соответствовали исходной модели. Диапазон значений объёмного содержания волокон колебался в пределах $\pm 0,2$ –2% от данного значения.

Были получены три вариации распределения угла ориентации волокон, отличающиеся от исходного. Распределения ориентации были выбраны таким образом, что каждая последующая вариация не только увеличивала диапазон значений угла ориентации, но и долю часто встречающихся значений в модели. В частности, были созданы распределения углов ориентации, включающие значения от 0 до 35°, от 0 до 60° и от 0 до 90°. Для каждой вариации использовалось исходное распределение длин волокон, определённое методом микрокомпьютерной томографии. Вариации с различными распределениями углов ориентации обозначены как A1, A2 и A3, соответственно.

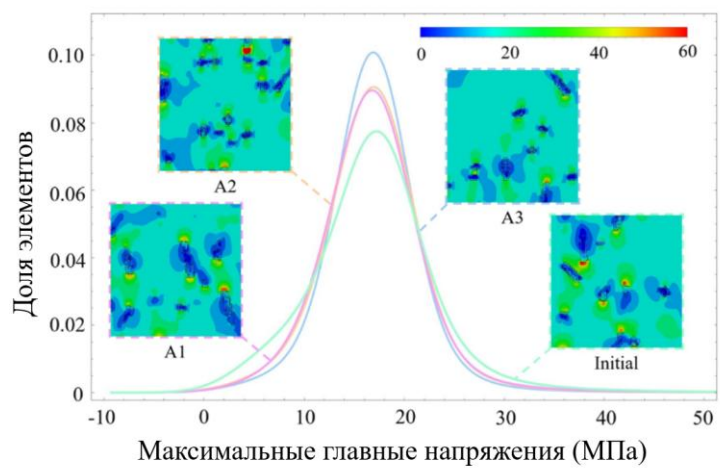
На рисунке 5.17 представлены графики распределения вероятностей для максимальных главных напряжений в матрице моделей при 1% деформации для всех трёх типов армирующих элементов с различными распределениями углов ориентации волокон.



(а)



(б)



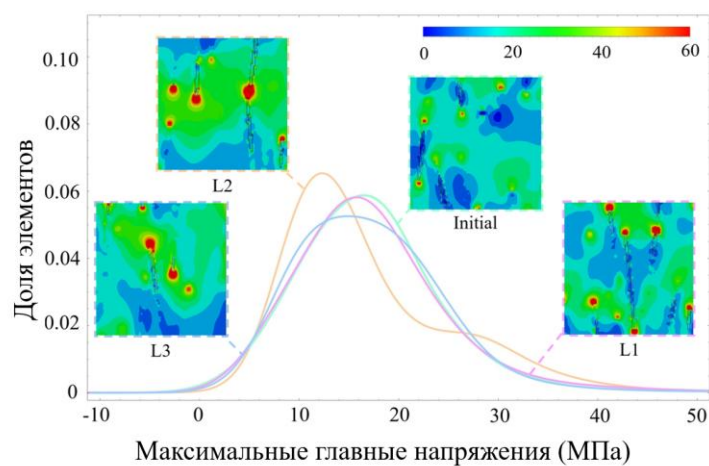
(в)

Рисунок 5.17 – Распределение вероятностей максимальных главных напряжений для структурных моделей: (а) АБС+УВ, (б) АБС+СВ, (в) АБС+БВ

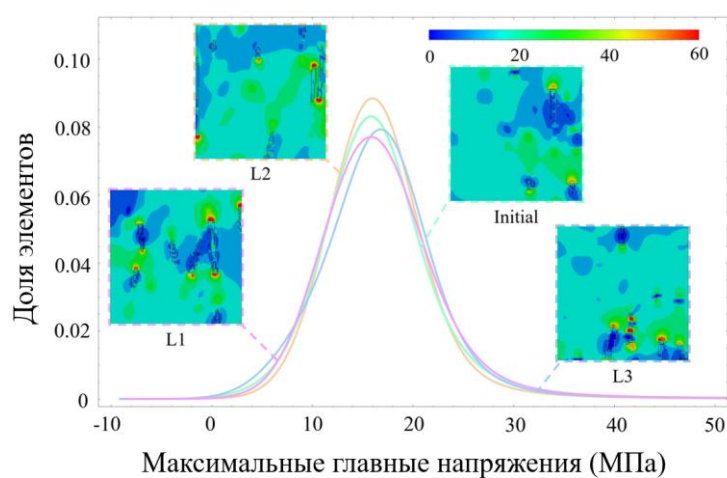
Графики распределения максимальных главных напряжений демонстрируют характер нормального распределения. Варьирование распределения углов ориентации волокон не изменяло характер распределения напряжений. Например, для всех рассмотренных материалов графики распределений максимальных главных напряжений для моделей типа АЗ в целом располагаются выше, чем для других распределений. Это указывает на преимущество расширения диапазона углов ориентации волокон в структуре с точки зрения прочности.

В случае композита с УВ распределение напряжений оказалось наиболее чувствительным к вариациям угла ориентации волокон. Различия между кривыми распределения напряжений в моделях с данным типом армирующего материала выражены наиболее сильно. Это может быть связано как с отличиями в диаметрах волокон различных материалов (углеродные волокна в несколько раз тоньше стеклянных и базальтовых), так и с механическими свойствами материала волокон: модули упругости углеродных волокон в 2,5–3 раза выше, чем у базальтовых и стеклянных волокон соответственно. Графики распределения вероятностей напряжений для моделей АБС+БВ с распределениями углов ориентации волокон А1 и А2 оказались близки друг к другу.

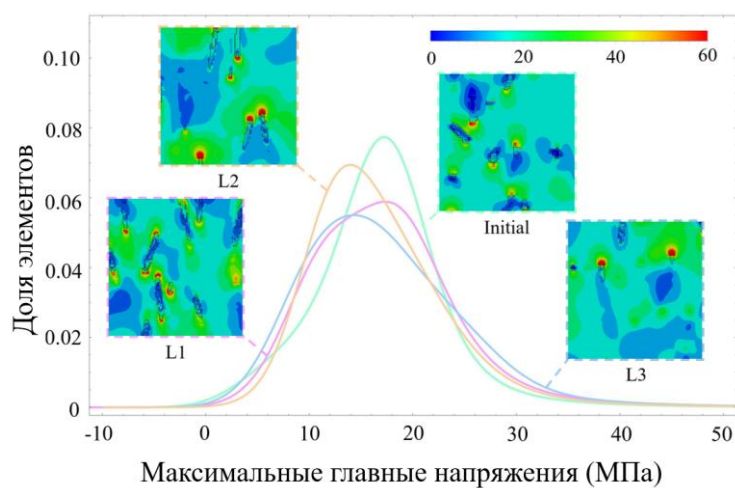
Рассматривались также вариации распределения длин волокон: случаи увеличенной длины волокон ($L1$ и $L2$), а также увеличение доли часто встречающихся значений в расширенном диапазоне длин ($L3$). Графики функций распределения максимальных главных напряжений для моделей с вариацией распределения длин волокон представлены на рисунке 5.18.



(а)



(б)



(в)

Рисунок 5.18 – Распределение вероятностей максимальных главных напряжений для структурных моделей при вариации длины волокон: (а) АБС+УВ, (б) АБС+СВ, (в) АБС+БВ

Изменение распределения длин волокон оказало влияние на распределение напряжений для моделей АБС+УВ и АБС+БВ. Для обоих материалов увеличение длины волокон приводило к смещению пика функции распределения вероятностей в сторону меньших значений напряжений. Для модели АБС+УВ типа L2 было зафиксировано изменение характера распределения: возникновение второго пика связано с перераспределением напряжений, в частности с передачей нагрузки от части элементов матрицы. Это указывает на то, что матрица преимущественно испытывала низкие напряжения, тогда как концентраторы напряжений имели значения в диапазоне 22–45 МПа.

Характер распределений вероятностей напряжений для материала СВ отличался от других наполнителей. Общее напряжённое состояние структуры композита АБС+СВ практически не изменялось при исследованных вариациях длины армирующих волокон.

Для модели материала АБС+БВ каждая вариация распределения длин волокон характеризовалась расширением диапазона преобладающих значений напряжений. В частности, применение распределения длин волокон типа L3 приводило к увеличению числа концентраторов напряжений. Таким образом, в отличие от угла ориентации волокон, распределение их длины в композите оказывало заметное влияние на механический отклик структур.

Хаотичное расположение волокон может приводить к вариациям объёмной доли в различных сечениях филамента. При этом скопление волокон способно усиливать структуру, однако истончение матрицы между волокнами вызывает локальные концентрации напряжений и потенциальные разрушения. Для исследования влияния этого фактора, помимо равномерного распределения положений волокон, были рассмотрены три других закона распределения: треугольное, гамма- и экспоненциальное. Изменения концентрации по высоте элементарной ячейки представлены на рисунке 5.19.

Для каждого материала были построены модели с таким градиентным расположением волокон внутри ячейки.

Распределение углов ориентации и длины волокон в этих моделях соответствовало исходным экспериментальным данным. Размеры элементарной ячейки составляли: $200 \times 100 \times 375$ мкм³ для моделей АБС+УВ, $250 \times 150 \times 525$ мкм³ для АБС+СВ и $225 \times 150 \times 450$ мкм³ для АБС+БВ. Объёмная доля волокон в ячейке фиксировалась. Отклонение объёмной доли от значений, соответствующих исследованным композитам, не превышало 2%.

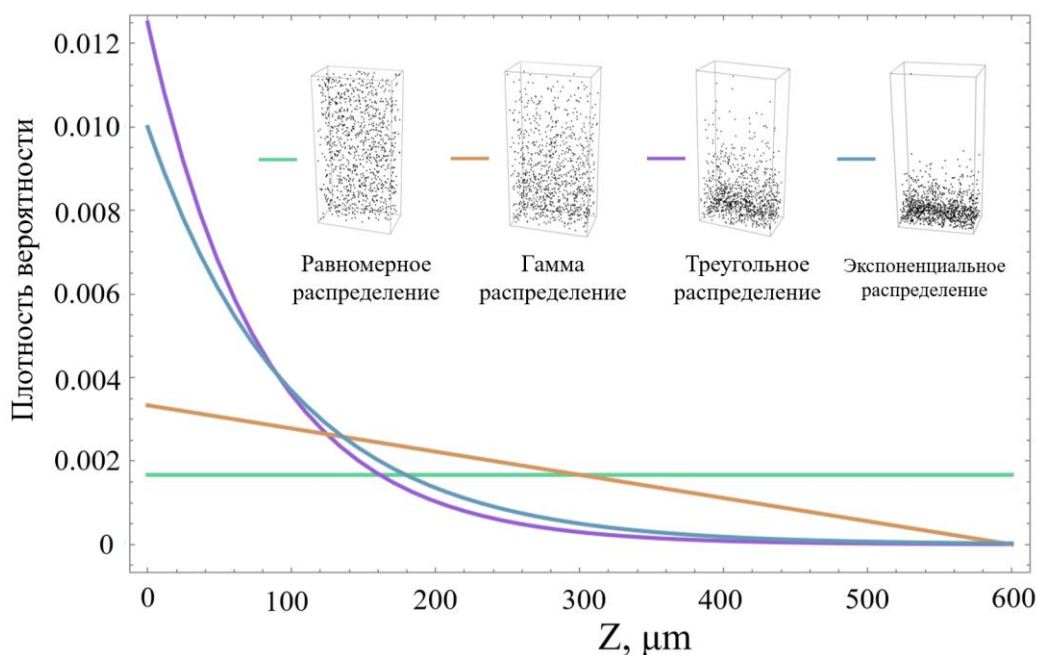


Рисунок 5.19 – Законы распределения в представительных объёмах с градиентом расположения волокон вдоль оси Z

Максимальные главные напряжения, возникающие в матрице композита при растяжении, представлены на рисунке 5.20.

Градиентное расположение волокон в матрице по закону гамма-распределения оказало влияние на напряжённое состояние моделей. Для материалов АБС+СВ и АБС+БВ наблюдалось смещение пика на графике в сторону больших значений напряжений. Таким образом, такое расположение

волокон в композите инициировало более высокие напряжения по сравнению с композитом с равномерным распределением волокон в матрице.

Для материала АБС+УВ, напротив, наблюдалось существенное перераспределение напряжений по структуре. В этом случае характер распределения максимальных главных напряжений приобретал бимодальный вид: фиксировались два пика, соответствующие напряжениям 13 МПа и 21 МПа.

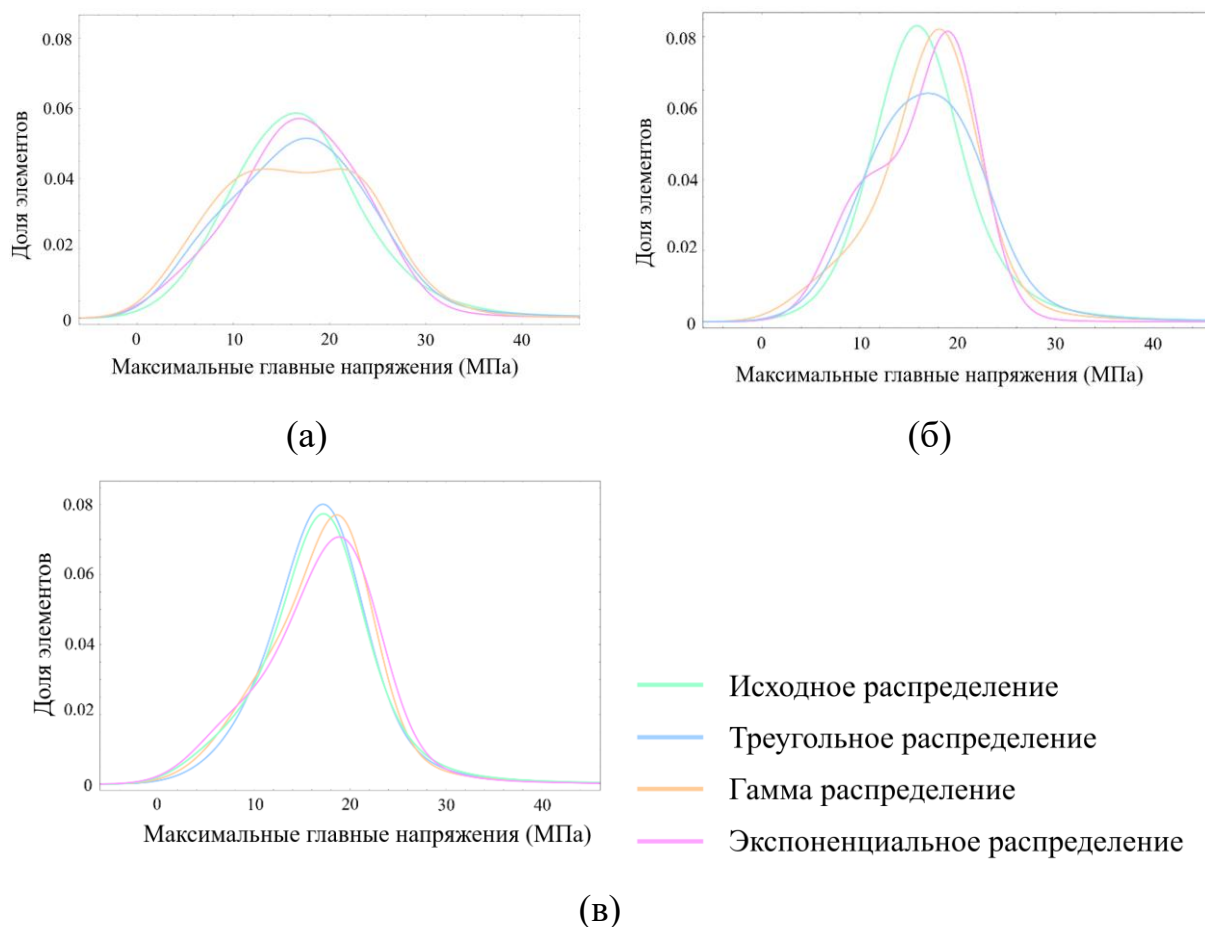


Рисунок 5.20 – Распределение напряжений для градиентных моделей АБС+УВ (а), АБС+СВ (б), and АБС+БВ (в)

График распределения вероятностей для структурных моделей АБС+БВ с треугольным распределением волокон был схож с графиком исходной структуры. Для АБС+СВ отмечалось значительное перераспределение

напряжений по структуре, тогда как для модели материала АБС+УВ это проявлялось в меньшей степени.

При распределении коротких волокон в соответствии с экспоненциальным законом в модели АБС+БВ пик кривой распределения напряжений смещался в сторону больших значений напряжений. Аналогично, в модели АБС+СВ также происходило смещение пика, однако при этом дополнительно изменялся и характер самих распределений.

Контраст свойств между матрицей и армирующими волокнами играет ключевую роль в определении напряжённо-деформированного состояния и механического отклика композита. Чем выше разница в модулях упругости и прочности между компонентами, тем более выраженными становятся эффекты перераспределения напряжений на границе раздела фаз. Изменение модуля упругости материала матрицы в композите оказывает влияние не только на эффективные упругие свойства композита, но и на характер распределения напряжений. Для оценки влияния свойств матрицы на напряженное состояние композита, для исходной модели АБС+УВ был проведен численный расчет с измененными свойствами матрицы. Упругий модуль материала матрицы был увеличен в 3.3 раза. На рисунке 5.21 представлен график распределения максимальных главных напряжений, полученных для моделей с различными свойствами матрицы.



Рисунок 5.21 – Распределение максимальных главных напряжений в модели АБС+УВ с различными свойствами матрицы

В случае исследуемых материалов наибольший контраст наблюдался для композитов с углеродными волокнами (АБС+УВ): модуль упругости углеродных волокон в 2,5–3 раза превышает аналогичные характеристики базальтовых и стеклянных волокон. Это приводит к более выраженной чувствительности распределения напряжений к изменению геометрических параметров (угол ориентации, длина волокон, характер распределения), а также к возникновению бимодальных распределений напряжений вследствие значительного перераспределения нагрузки между матрицей и армирующими элементами. Для композитов АБС+СВ и АБС+БВ влияние контраста выражено слабее из-за меньших различий в механических свойствах компонентов. В таких структурах распределение напряжений оказывается более равномерным, а изменения, вызванные варьированием микроструктурных параметров, носят менее резкий характер.

Эффективность армирования короткими волокнами была сопоставлена со случаем армирования непрерывными волокнами в рамках той же механической постановки задачи.

На рисунке 5.22 представлены распределения максимальных главных напряжений для структурных моделей с ориентированным и случайным расположением армирующих волокон. Полученные результаты показывают, что характер пространственной ориентации волокон оказывает ключевое влияние на напряжённое состояние матрицы композитов.

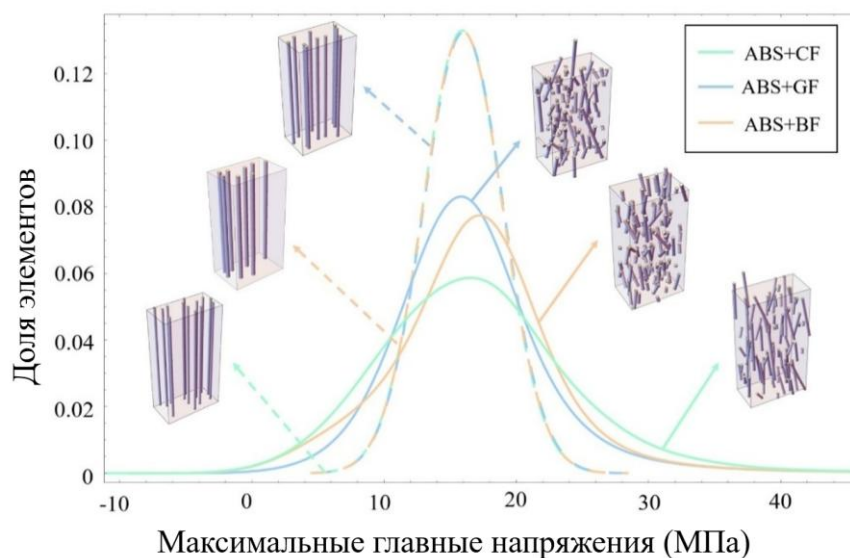


Рисунок 5.22 – Сравнение распределения максимальных главных напряжений для моделей, армированных короткими и непрерывными волокнами

Для моделей с ориентированными (непрерывными) волокнами распределения напряжений имеют более узкий и выраженный пик, смещённый в область меньших значений напряжений. Это указывает на равномерное перераспределение нагрузки и снижение числа концентраторов напряжений. В таких структурах матрица испытывает меньшие локальные перегрузки, что способствует повышению общей прочности композита. В противоположность этому, для моделей со случайной ориентацией коротких волокон кривые распределений становятся более широкими и смещаются в область повышенных напряжений. Это свидетельствует о появлении дополнительных локальных концентраций напряжений и менее равномерном

распределении нагрузки в структуре, что снижает эффективность армирования.

Сравнительный анализ различных материалов показал, что наибольший выигрыш от ориентированного армирования наблюдается в случае АБС+СВ, где смещение распределения влево наиболее выражено. Для АБС+УВ характер распределения более пологий, что связано с высоким контрастом свойств между матрицей и углеродными волокнами, а также их меньшим диаметром, что усиливает локальные концентрации. АБС+БВ занимает промежуточное положение между углеродным и стеклянным армированием, демонстрируя как тенденцию к снижению напряжений при ориентации волокон, так и определённую устойчивость распределений при случайной ориентации.

Таким образом, ориентированное армирование существенно улучшает механический отклик композитов на основе АБС независимо от типа армирующего материала, однако степень этого улучшения зависит от контраста свойств матрицы и волокон, а также морфологических параметров. Особенности механического отклика находят отражение в изменениях распределения напряжений, возникающих в неоднородном материале при приложении нагрузки. Полученные в данном разделе результаты опубликованы в статьях [122, 127].

Исходя проведенного анализа можно сделать вывод о том, что распределения напряжений и деформаций в компонентах представительного объема и в нем в целом в большинстве случаев могут быть описаны одним из параметрических распределений, которое определяется тремя центральными статистическими моментами. Для аппроксимации полей с использованием таких распределений необходимы структурные моментные функции до 5-го порядка, а также использования первых двух приближений решения стохастической краевой задачи.

ГЛАВА 6. Применение методов стохастической механики для решения задач проектирования и прогнозирования поведения неоднородных сред

Комбинация морфологических и механических статистических характеристик определяет напряженно-деформированное состояние представительного объема при нагружении. Структуры, у которых эти характеристики совпадают, можно считать статистически эквивалентными. Данный факт можно использовать для проектирования структур с необходимым механическим откликом и геометрическим строением. Такие задачи характерны, в частности, для биомедицинских приложений, где, например, структура имплантата должна быть рациональна подобрана для наибольшего соответствия требованиям окружающих тканей и особенностям конкретного пациента.

В качестве примера возможности применения разработанных методов по анализу статистических распределений в решении практических задач проектирования и дизайна структур было рассмотрено сравнение решетчатых скаффолдов для регенерации костной ткани с различными типами дизайна путем сопоставления их механического отклика с характеристиками реальных фрагментов костной трабекулярной структуры на основе анализа распределений напряжений в материале решетки. Кроме того, была рассмотрена задача проектирования механического отклика в ауксетичных композитных метаматериалах, где инструментарий стохастического анализа использовался для контроля возможности управления эффективными характеристиками за счет изменения свойства одной из фаз.

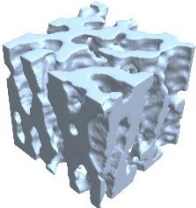
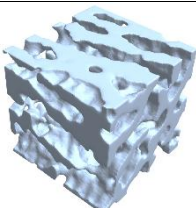
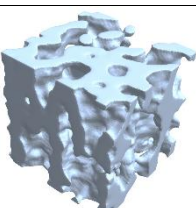
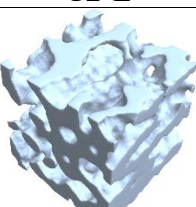
6.1. Адаптация механического отклика биомедицинских скаффолдов для регенерации костной ткани

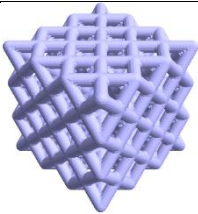
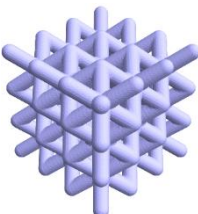
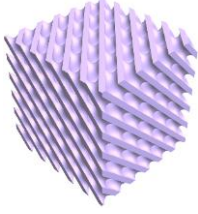
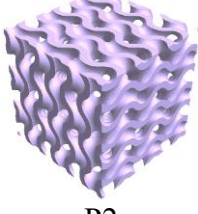
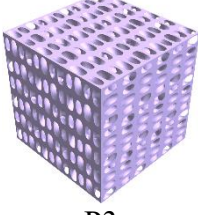
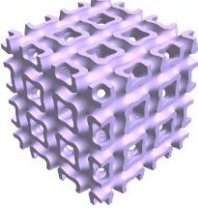
Повреждение костей может потребовать использования биосовместимых имплантатов для восстановления их целостности, морфологии и, как следствие, механических свойств. В случае локального повреждения кость способна к самовосстановлению, однако при серьёзных повреждениях, когда требуется замена части кости, могут понадобиться скаффолды для восстановления функций кости, её механических и биологических свойств [395–397]. Цель такого хирургически интегрируемого имплантата — восстановить целостность костной ткани или заменить утраченную, тем самым восстановив ее функцию. Помимо характеристик биосовместимости и, в зависимости от области применения, биodeградируемости, существует ряд требований, которым должны отвечать имплантаты, используемые в тканевой инженерии: способность имитировать структуру и биологические функции ткани; механическая поддержка клеток, обеспечивающая их пролиферацию и дифференцировку; контроль структуры и биологических функций сформированной ткани. Таким образом, скаффолды должны обладать пористостью и механическими свойствами, аналогичными замещаемой кости. В настоящее время для изготовления индивидуальных скаффолдов используются технологии аддитивного производства.

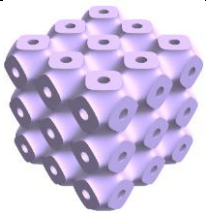
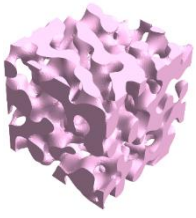
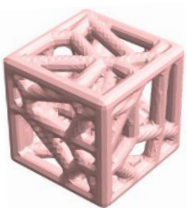
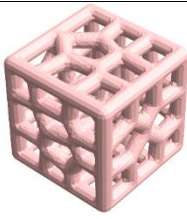
Как известно, механические свойства и проницаемость решетчатых структур зависят от их морфологических характеристик, таких как тип элементарной ячейки, пористость и размер пор [398–402]. Были проанализированы фрагменты трехмерной геометрии кости, полученные с помощью компьютерной томографии с высоким разрешением реальной трабекулярной кости человека. Для оценки влияния различных конструкций скаффолдов на имитацию свойств замещаемого фрагмента кости сравнивались несколько геометрий трёхмерных структур, разработанных на

основе различных подходов (таблица 6.1): регулярные структуры на основе повторяющейся элементарной ячейки, структуры, основанные на аналитическом описании 3D поверхностей, случайные структуры, построенные с использованием диаграммы Вороного, а также алгоритм фазового разделения с применением случайных гауссовских полей.

Таблица 6.1 – Геометрические модели и их параметры

Изображение и обозначение	Структура	Источник	Объемная доля пор, %	Удельная площадь поверхности, mm^2/mm^3
Биомиметические структуры				
 T1-L	Фрагмент #1 трабекулярной кости в осевом направлении	[403, 404]	55.2	0.62
 T1-T	Фрагмент #1 трабекулярной кости в трансверсальном направлении			
 T2-L	Фрагмент #2 трабекулярной кости в осевом направлении		56.8	0.57
 T2-T	Фрагмент #2 трабекулярной кости в трансверсальном направлении			

Решетчатые структуры				
 C1	Гранецентрированная кубическая (FCC) структура	[405–407]	59.1	0.78
 C2	Объемно-центрированная кубическая (BCC) структура		59.4	0.57
Структуры на основе трижды периодических минимальных поверхностей				
 P1	Алмазная структура	[402, 408–413]	57.1	1.15
 P2	Структура гироида		58.8	0.96
 P3	Структура, построенная на основе вариации гироида		57.6	1.64
 P4	Плотно-упакованная структура		58.1	1.07

 P5	Примитивная структура		57.1	0.74
Двунепрерывная структура				
 B	Двунепрерывная случайная структура	[414, 415]	57.9	0.66
Структуры Вороного				
 V1	Структура, основанная на стандартной диаграмме Вороного	[397, 416, 417]	55.9	0.55
 V2	Структура, основанная на диаграмме Вороного, с применением алгоритма релаксации Ллойда		57.0	0.58

Эффективная пористость служит объединяющим параметром для каждой структуры и соотносится с уровнем пористости исходных фрагментов трабекулярной кости, полученных на основе данных микрокомпьютерной томографии.

Основной тип нагрузки, испытываемой костной тканью, — сжатие. Соответственно, для первоначальной оценки механического отклика разработанных прототипов необходимо исследовать их поведение при сжимающих нагрузках. Были созданы трёхмерные конечно-элементные модели всех анализируемых структур. Каждая структура была дискретизирована тетраэдральными четырёхузловыми объёмными элементами с использованием оригинальных алгоритмов, созданных в среде

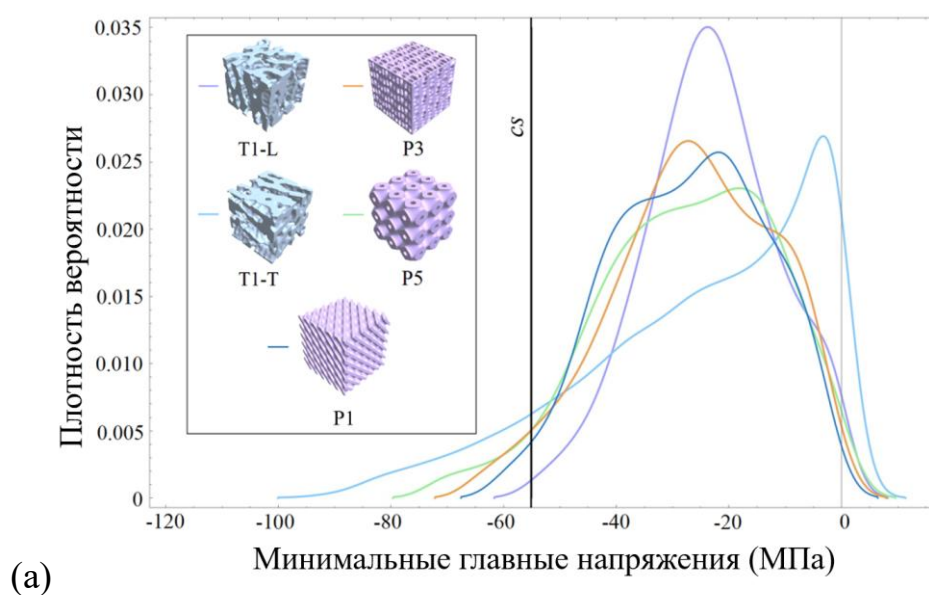
Wolfram Mathematica, а затем импортирована в SIMULIA Abaqus в виде КЭ-модели с элементами типа C3D4. Максимально допустимый линейный размер элемента составлял 0,05 мм. Это значение было определено на основе оценки сходимости КЭ-сетки по отношению к эффективному модулю упругости при сжатии. Предполагалось, что деформации под действием сжимающих нагрузок подчиняются закону Гука для изотропных сред и не превышают предел упругости материала, поэтому пластические деформации не учитывались. Прототипы образцов структур изготовлены из полилактида (PLA) с использованием технологии аддитивного производства послойным наплавлением филамента. Их локальное деформационное поведение, процессы накопления повреждений и эффективные упругие свойства оценивались с помощью численного моделирования и сравнивались с экспериментальными данными, полученными в ходе испытаний на сжатие образцов, изготовленных аддитивным способом, с применением метода корреляции цифровых изображений. Эксперименты с напечатанными структурами проводились только в пределах упругой области. Это позволило выполнить валидацию разработанных численных моделей и качественное сравнение напечатанных образцов с их конечно-элементными аналогами.

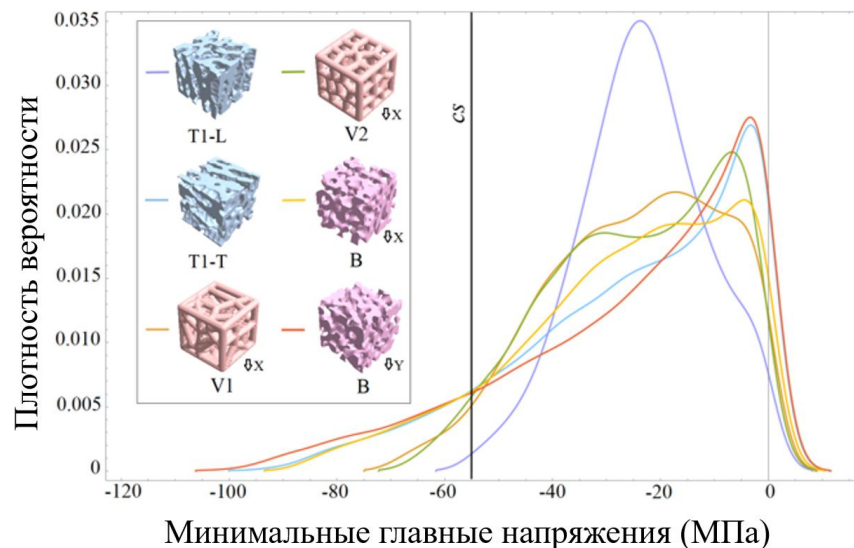
Значение модуля упругости для полилактида принималось равным 2717 МПа, а коэффициент Пуассона 0,36 [418]. Предельная прочность при сжатии 55 МПа была определена в собственных экспериментах [419]. Для задания граничных условий были созданы две опорные точки, связанные с узлами на верхней и нижней гранях конечно-элементных моделей с использованием параметров «узел-к-поверхности». Нагрузка представляла собой сосредоточенную силу, приложенную к опорной точке, связанной с верхней гранью. Нижняя грань была жёстко зафиксирована ($U_1=U_2=U_3=UR_1=UR_2=UR_3=0$). Для верхней поверхности перемещения были ограничены вдоль осей X и Z ($U_1=U_3=0$).

В данной задаче для количественной оценки доли элементов, достигших предельного состояния, и связи этой доли с архитектурными особенностями конструкции можно использовать методы анализа распределения случайных величин. Используемые гистограммы позволяют оценить относительную долю конечных элементов, в которых напряжения (или инварианты напряжений) превышали пределы. Критическое значение напряжений может использоваться в качестве порогового для распределений плотности вероятности, что позволяет определить относительное количество элементов, разрушающихся при заданной сжимающей нагрузке.

Для анализа распределения напряжений в объёме исследуемых структур под сжимающей нагрузкой 4000 Н использовались сглаженные (интерполированные) гистограммы. Вертикальная линия на графике (обозначенная как σ_s) указывает на значение прочности материала при сжатии 55 МПа, отделяя зону потенциально разрушенных элементов (слева от порога, с напряжениями, превышающими предел). На рисунке 6.1 представлены такие гистограммы для двух образцов трабекулярной структуры, каждый из которых исследован в двух ориентациях. Наблюдается явное различие в характере распределений минимальных главных напряжений в этих моделях: гистограммы для трабекулярных структур в осевой ориентации (T1-L и T2-L) соответствуют нормальному распределению, тогда как распределения для тех же структур в трансверсальной ориентации имеют выраженную скошенность вправо (в сторону меньших значений) и более длинный хвост слева, с большей частью напряжений, превышающих прочность при сжатии. Было установлено, что оба типа распределений можно описать параметрическим скошенным нормальным распределением. Однако не все исследуемые структуры могут быть описаны этим распределением, поэтому механический отклик анализировался на основе сглаженных гистограмм.

Все созданные модели были разделены на две группы. Первая группа включала структуры с ориентационно-независимой кубической симметрией: решётчатые структуры и структуры на основе трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП), у которых площадь поверхности наиболее близка к площади поверхности трабекулярной микроструктуры. Вторая группа состояла из структур со случайной морфологией и анизотропным поведением. Непериодические структуры, такие как В, V1 и V2, нагружались в трёх направлениях, поскольку эти структуры могут проявлять некоторую степень анизотропии. Распределения напряжений для этих структур были получены при различных направлениях нагрузки. Распределения минимальных главных напряжений для исследуемых структур демонстрировали механическое поведение, сходное с поведением кости (см. рисунок 6.1).





(б)

Рисунок 6.1 – Плотность вероятности распределения минимальных главных напряжений для структур в сравнении с T1: (а) P1, P3 и P5; (б) V1, V2 и B (с — прочность при сжатии; стрелки в легенде указывают направление нагрузки)

В первой группе распределение вероятностей минимальных главных напряжений для структуры P3 ближе всего к распределению для фрагмента трабекулярной кости T1 (рисунок 6.1а). Однако пик графика, соответствующий костной структуре, был выше, что указывает на преимущество прочности этой структуры по сравнению с созданными моделями. Это связано с тем, что большая доля элементов структуры испытывает напряжения, соответствующие значениям в области пика. В результате вероятность возникновения более высоких значений напряжений и появления локальных концентраторов напряжений снижается. Максимальные значения напряжений в структурах P1, P3 и P5 были ниже, чем соответствующие значения в T1-L, но выше, чем в T1-T. Максимальная доля элементов с напряжениями, превышающими прочность материала при сжатии, составила 7.1% (структура C2), а минимальная — 1.2% (структура P1). В структурах с регулярными решётками (C1, C2 и P1-P5) абсолютные

значения напряжений в элементах превышали средние значения для трабекулярных структур, что отражается сдвигом гистограмм влево и увеличением числа элементов с напряжениями выше уровня прочности.

Очевидно, что структуры из второй группы (V1, V2 и B) в целом следовали характеру распределения напряжений, наблюдаемому в трабекулярных структурах с поперечной нагрузкой (T1-T и T2-T), и не испытывали значительного влияния изменения направления приложенной нагрузки (рисунок 6.1б). Несмотря на морфометрические различия между этими структурами, все модели показывали абсолютное значение средних напряжений, близкое к значениям для трабекулярных структур.

Хотя этот подход позволял вычислить долю элементов скаффолдов с началом разрушения, он не предоставляет информации о местоположении этих элементов. Тем не менее, он позволяет проводить качественное и количественное сравнение механических характеристик исследуемых конструкций. Например, если объёмная доля элементов с началом разрушения в скаффолде значительно превышает аналогичный показатель в образце кости (разница более 5%), то конструкция скаффолда считается недостаточно прочной для эффективной замены костной ткани. Результаты по данному разделу опубликованы в статьях [130, 133].

6.2. Оценка механического отклика мультиморфологических скаффолдов с градиентном пористости

Сложная морфология костной ткани может быть достигнута в разработанных скаффолдах несколькими способами, одним из которых является использование функционального градиента. Разнообразие морфологии элементарных ячеек и различные типы градиентов открывают широкие возможности для создания скаффолдов, используемых на границе

различных типов костной ткани, например, при восстановлении поврежденного участка, включающего трабекулярную и кортикальную костные ткани. Предлагаемые структуры сочетают в себе высокопроницаемые элементы, соответствующие трабекулярной кости, и низкопористые структуры, соответствующие кортикальной кости.

Для синтеза моделей взаимопроникающих открыто-ячеистых решетчатых структур были использованы методы, основанные на аналитическом определении трехмерных поверхностей, разделяющих две фазы. В общем случае функция ТПМП определяется следующим выражением [420]:

$$\phi(r) = \sum_i^I \sum_j^J \mu_{ml} \cos(2\pi k_l(P_m^T r)) = C, \quad (6.1)$$

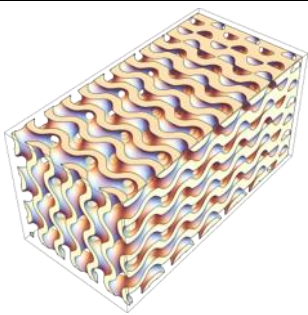
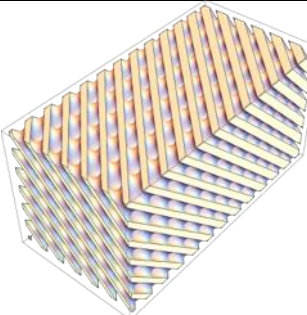
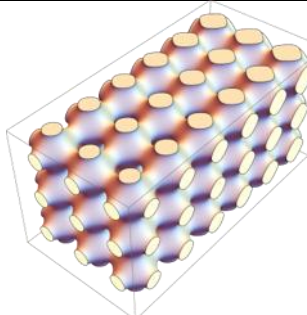
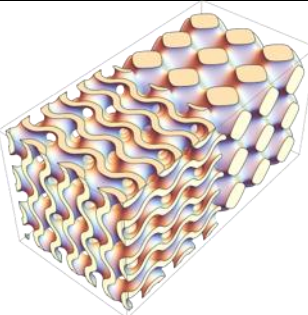
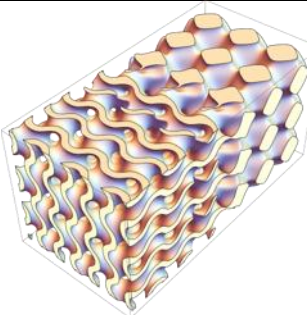
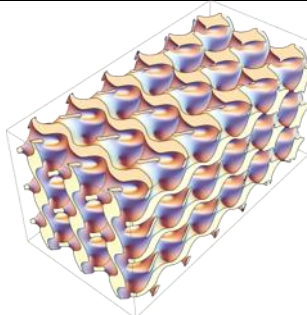
где μ_{ml} периодический момент, k_l масштабный коэффициент, $P_m[a_m, b_m, c_m]$ базисный вектор, $r[x, y, z]$ локальный вектор, C параметр, контролирующий пористость. Для анализа влияния градиента на распределение напряжений в структурах параметры градиента варьировались с целью получения различных свойств перехода между геометриями - от более резкого к более плавному. Были исследованы следующие модели градиента пористости: G (гироидная структура), D (алмазная структура) и P (примитивная структура) с градиентом пористости от 60% до 30% (таблица 6.2).

Для моделирования были использованы те же исходные параметры и константы, что и для задачи, представленной в разделе 6.1. Для результатов КЭ-моделирования были построены соответствующие гистограммы плотности вероятности распределения напряжений. Поскольку в рассматриваемых моделях задавалось упругопластическое поведение материала, анализ напряженного состояния проводился на основе распределения напряжений фон Мизеса. Ось ординат сглаженных гистограмм

показывает плотность вероятности общего числа элементов в КЭ-модели, в которых значение напряжения соответствует значению на оси абсцисс.

Оценивалось влияние градиента морфологии на механическое поведение структур $GP_I N$, $GP_I M$ и $GP_I W$. В их основе лежит гироидная структура поверхности с начальной пористостью элементарных ячеек 60% и примитивная структура поверхности с начальной пористостью элементарных ячеек 30%, поэтому целесообразно провести сравнение с базовыми пористо-градиентными структурами G и P, основанными на тех же элементарных ячейках.

Таблица 6.2 – Структуры с градиентом пористости и градиентом морфологии, включающие ячейки 3 x 6 x 3

Параметр	G	D	P _I
Визуализация структуры			
Средняя пористость, %	43.3	43.6	45.4
Параметр	$GP_I N$	$GP_I M$	$GP_I W$
Визуализация структуры			
Средняя пористость, %	45.9	44.2	42

Согласно полученным распределениям (рисунок 6.2), размер переходной зоны между различными типами геометрии оказывает

существенное влияние на долю объема модели, в котором значения напряжений превышают величину предела текучести, что приводит к разрушению.

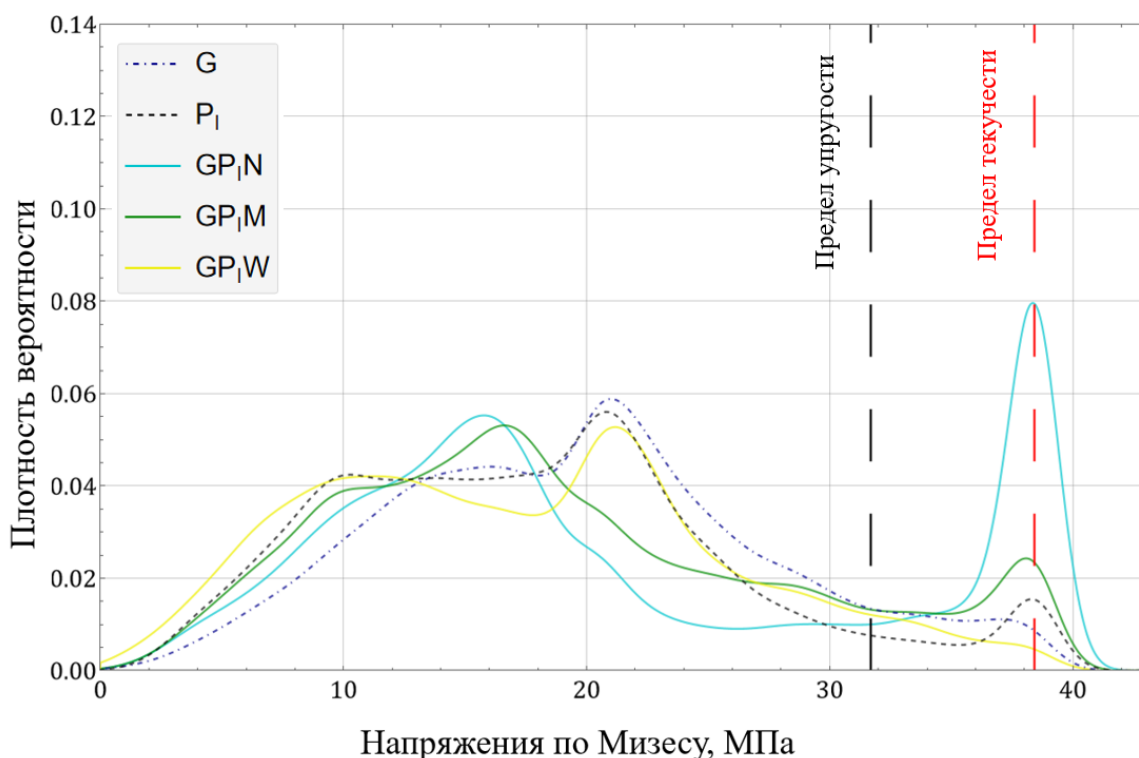


Рисунок 6.2 – Распределение плотности вероятности для напряжений по Мизесу в структурах с градиентом пористости

Сглаженные гистограммы плотности вероятности для структур с градиентом неоднородности показали два локальных пика концентрации напряжений. Вероятность разрушения градиентно-пористых структур составила 1,2% для модели G и 3,4% для модели P_I. При этом доля объема элементов со значениями напряжений, превышающими предел упругости, составила 8,1 и 7,0% соответственно. В целом размер переходной зоны, контролируемый параметрами градиента морфологии, оказывал существенное влияние на вероятность разрушения структуры.

Таким образом, статистический подход с расчетом функции распределения вероятностей для напряжений во всех частях объема конструкции может стать эффективным инструментом проектирования: каждое изменение параметров конструкции может быть оценено по доле объема с избыточными напряжениями и использовано в качестве меры качества конструкции. Представленные результаты были опубликованы в статье [123].

6.3. Исследования изменения распределений напряжений в скаффолдах в процессе биodeградации полимерного материала

В биомедицинских приложениях искусственные структуры зачастую подвергаются воздействию физиологических сред, из-за чего происходит процесс деградации (резорбции) материала. Для анализа влияния различных типов деградации на прочностные свойства полимерных структур на основе ТПМП исследовалось механическое поведение на определенном этапе: 0%, 12.5%, 25%, 37.5% и 50% деградации. Были смоделированы элементарные ячейки на основе ТПМП с пористостью 30% (рисунок 6.3), габариты 5x5x5 мм. В качестве модели материала был использован полилактид.

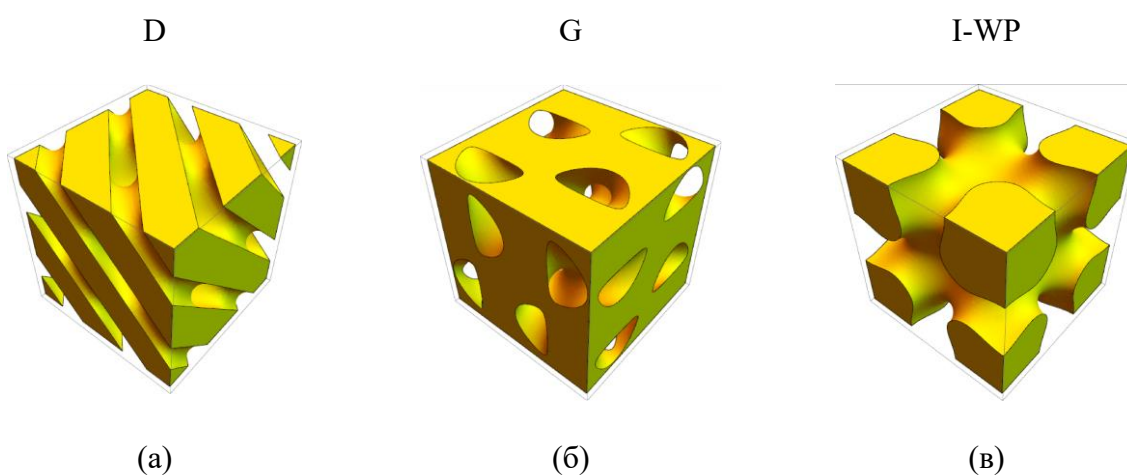


Рисунок 6.3 – Визуализация моделей элементарных ячеек: (а) D; (б) G; (в) I-WP

Поскольку механизмы объемной и поверхностной эрозии различны по своему воздействию на структуру, использовались отдельные подходы к моделированию их дискретных этапов. При рассмотрении влияния объемной деградации структуры на её механическое поведение моделирование каждого этапа заключалось в занижении упругих свойств материала (таблица 6.3), при этом данный процесс не затрагивал морфологию структуры. Таким образом, для анализа влияния объемной деградации на механическое поведение рассматривались модели с предварительно заданными заниженными упругими свойствами материала. Свойства занижались с шагом 12.5% пропорционально рассматриваемому шагу деградации.

Таблица 6.3 – Изменение модуля Юнга на различных этапах объемной эрозии

Деградация, %	0	12.5	25	37.5	50
Упругий модуль полилактида, МПа	1660	1452.5	1245	1037.5	830

Для моделирования поверхностной деградации при рассмотрении каждого этапа деградации наблюдалось уменьшение общего объёма структуры. Предполагалось, что поверхностная деградация происходила равномерно в результате пропорционального истончения внутренней поверхности структуры (рисунок 6.4).

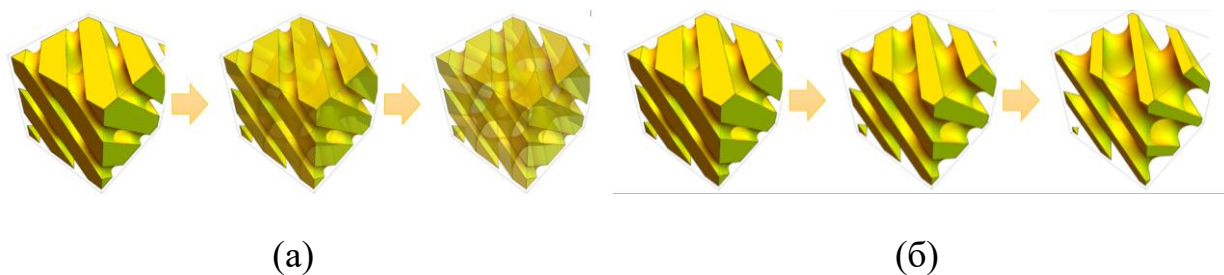


Рисунок 6.4 – Схематическое изображение стадий объемной (а) и поверхностной (б) эрозии для элементарной ячейки структуры D с начальной пористостью 30%

Для оценки влияния предложенных подходов к численному моделированию деградации на деформационное поведение прототипов скаффолдов были проведены квазистатические численные испытания с усилием 1000 Н на сжатие, с распределением нагрузки аналогично случаям, описанным выше.

Статистические распределения деформаций были получены для всего объема градиентных скаффолдов. Нормализация значений деформаций на величину ε_{macro} , соответствующим величине глобальной деформации, позволила оценить, насколько локальные деформации в зонах риска превышают глобальную деформацию. Влияние типа и стадии деградации на деформационное поведение исследованных скаффолдов проиллюстрировано на примере конструкции D (рисунок 6.5).

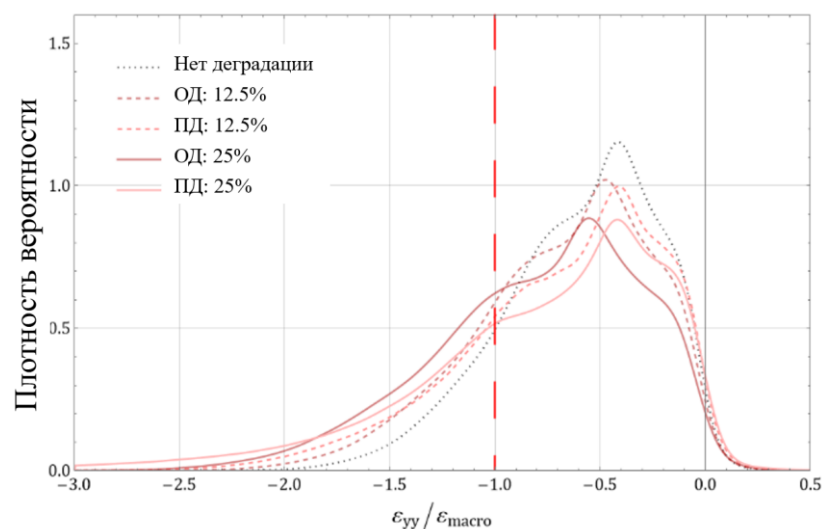


Рисунок 6.5 – Распределение нормированных деформаций в структуре D при массовой и поверхностной эрозии под сжатием с нагрузкой 1000 Н

Тип эрозии оказал существенное влияние на распределение деформаций в исследуемых скаффолдах, особенно заметное с ростом скорости деградации. По мере развития процесса деградации величина максимальных локальных деформаций в структурах, подвергнутых поверхностной деградации, значительно превышала начальную деформацию структуры, чего нельзя сказать о структурах, подвергнутых объемной деградации. Это видно по длине «хвоста» распределений (рисунок 6.5), демонстрирующего количество конечных элементов с деформациями, превышающими (или не превышающими) заданные значения глобальных деформаций $\frac{\varepsilon_{yy}}{\varepsilon_{macro}} = -1.0$.

Анализ распределений деформаций в структурах, полученных для уровня деградации 25 %, выявил сильное влияние типа геометрии скаффолда на его деформационное поведение (рисунок 6.6).

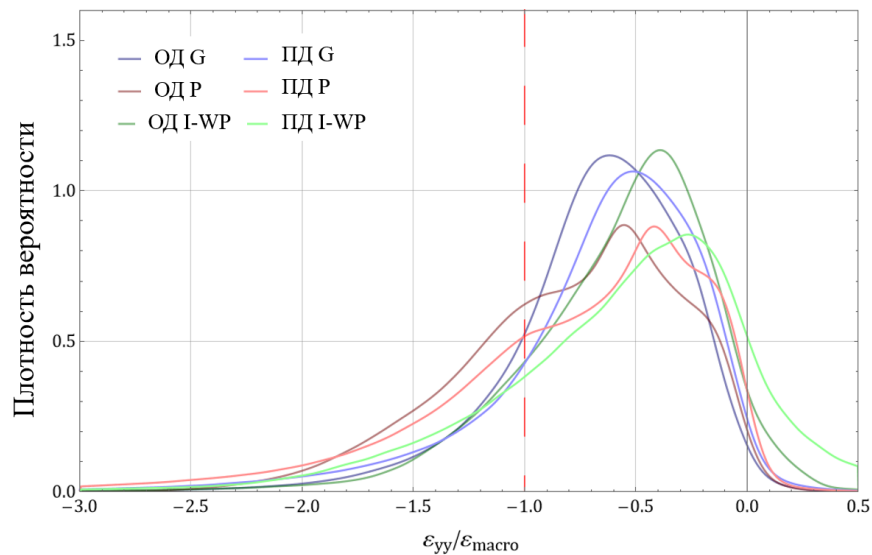


Рисунок 6.6 – Распределение нормированных осевых деформаций в функционально градиентных скаффолдах с эрозией 25 % под сжатием при нагрузке 1000 Н

Таким образом, для структуры D наблюдалось качественное сходство между поверхностной и объемной эрозией, в то время как для структуры I-WP соответствующие картины деформации были различными. Аналогичный эффект наблюдался ранее при анализе эффективных свойств элементарных ячеек. В структуре G наблюдалось качественное расхождение моделей деформации для различных режимов деградации, однако не столь значительное, как в структуре I-WP.

Полученные результаты могут быть учтены на этапе проектирования пористых полимерных скаффолдов, где программируются и учитываются как морфологические свойства, так и морфометрические характеристики. Результаты по разделу опубликованы в статье [129].

6.4. Влияние жесткости наполнителя на напряженно-деформированное состояние трехмерной двухкомпонентной ауксетичной решетчатой структуры

Структуры с управляемым механическим откликом могут быть созданы на основе концепции механических метаматериалов. Одним из видов таких структур являются ауксетики – структуры с отрицательным коэффициентом Пуассона, который достигается за счет особенностей геометрического строения. В данном разделе были рассмотрены двухфазные композиты с ауксетичной решетчатой структурой и наполнителем. Геометрические модели структуры были разработаны на основе повторно-входящей элементарной ячейки с осевой и поперечной ориентацией. Исследовано влияние модуля упругости наполнителя на эффективный коэффициент Пуассона двухфазной ауксетичной композитной структуры.

Двухфазные структуры состояли из $7 \times 5 \times 1$ ориентированных по оси элементарных ячеек; размеры полученной структуры составляли 30.9 мм х 30.9 мм х 3.9 мм. В результате структура образовывала квадрат в плоскости XY, что позволяло использовать одну и ту же структуру для анализа как структур с осевой ориентацией, так и поперечно ориентированных случаев, выполнив ее поворот на 90 градусов вдоль оси Z (рисунок 6.7).

Для получения тетраэдрической дискретизации с гладкой поверхностью на втором шаге к воксельной сетке обеих фаз был применен алгоритм Dual Marching Cubes, реализованный в Wolfram Mathematica. Этот итерационный вычислительный алгоритм был разработан для создания гладких разделяющих поверхностей для бинарных перечисленных объемов, которые часто создаются алгоритмами сегментации. Затем две сетки, образующие двухфазную структуру, были объединены путем объединения узлов в интерфейсе. Расчеты проводились с использованием SIMULIA Abaqus.

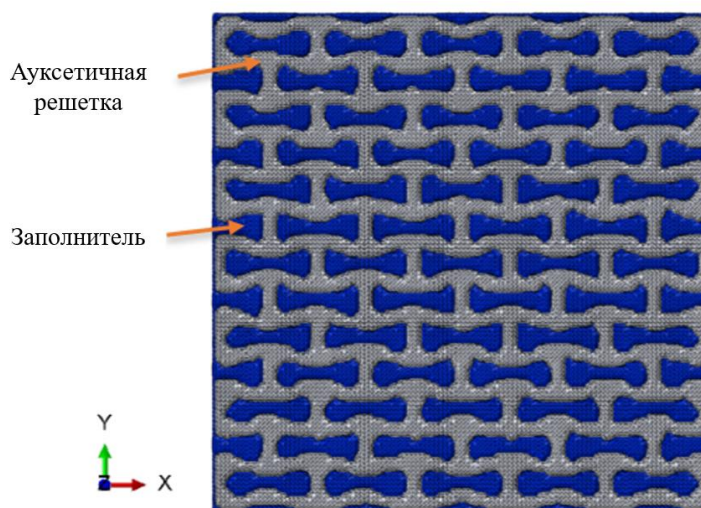


Рисунок 6.7 – Модель двухфазных ауксетичных структур

Упругие свойства полимерного материала были присвоены структуре решетки: модуль Юнга 2000 МПа, коэффициент Пуассона 0.35 и плотность 1.09 г/см³. Различные свойства модели были присвоены второй (наполнитель) фазе, значения используемого модуля упругости фазы наполнителя и соотношения между модулями упругости двух фаз приведены в Таблице 6.4. Низкие значения этого параметра мотивированы биомедицинскими применениями, например, полимерные ауксетичные скаффолды, окруженные мягкими биологическими тканями.

Таблица 6.4 – Характеристики решетки и двухфазной структуры

Модуль Юнга ауксетичной решетки, $E_{lattice}$, МПа	Модуль Юнга наполнителя, E_{filler} , МПа	Отношение между модулями, $E_{filler}/E_{lattice}$
2000	600	0.3
	200	0.1
	60	0.03
	20	0.01
	2	0.001
	0.2	0.0001

Растягивающее перемещение вдоль оси Y было приложено к верхним узлам каждой конструкции в обеих группах, в то время как другие степени свободы были ограничены. Нижние узлы были ограничены во всех направлениях. Диапазон смоделированных значений смещения соответствовал 0.25%, 1% и 3% деформации.

Статистический подход был применен к результатам моделирования для анализа полей напряжений, представленных в виде статистических распределений случайных величин. Для сравнения структур с различными свойствами наполнителя в качестве безразмерной меры напряжения использовались значения максимального главного напряжения, нормированные на величину предела прочности материала решетки. Продемонстрировало влияние наполнителя на механические характеристики двухфазных композитов с ауксетичными решетками. Гистограммы распределения напряжений в решетке для осевой и поперечной ориентаций структур при приложенных деформациях 0.25% и 1% представлены рисунке 6.8. Рассматривались три случая упругих свойств наполнителя: 200 МПа, 20 МПа и 0.2 МПа ($\frac{E_{filler}}{E_{lattice}}=0.1, 0.01 \text{ и } 10^{-4}$). Прочность при растяжении материала решетки была принята равной 30 МПа.

означает, что в некоторых частях структур критерий разрушения был удовлетворен.

Полученные результаты показывают, как свойства наполнителя отражаются на характеристиках статистических распределений, и как они могут быть использованы для управления поведением двухфазной структуры при разрушении. Более жесткий наполнитель может предотвратить рост напряжения в решетке, в то время как структуры с более податливым наполнителем быстрее накапливают напряжения. Было продемонстрировано, что изменение упругих свойств наполнителя может резко снизить способность структуры сохранять отрицательное эффективное значение коэффициента Пуассона. Этот эффект может быть использован для настройки и прогнозирования поведения ауксетичных решетчатых структур, которые предназначены для использования в контакте с окружающей средой, например, в биомедицинских приложениях.

Полученные результаты имеют важное значение для разработки ауксетичных композитов, ориентированных на биомедицинские применения, где взаимодействие с мягкими биологическими тканями требует тщательного подбора упругих свойств наполнителя. Управление жесткостью наполнителя позволяет точнее настраивать деформационные характеристики решетчатых структур, поддерживая желаемые механические свойства, включая сохранение отрицательного коэффициента Пуассона и улучшение сопротивляемости разрушению.

Полученные в данном разделе результаты опубликованы в работе [125].

ГЛАВА 7. Реконструкция геометрии неоднородных сред с применением морфологических статистических характеристик

С целью трансформации и подготовки экспериментальных данных для компьютерного моделирования и численного анализа в настоящее время активно развиваются подходы, позволяющие описывать и реконструировать представительные объемы неоднородных сред на масштабном уровне структурных неоднородностей. Описание микроструктуры включает в себя статистическое представление морфологии материала в виде характеристических функций, в то время как реконструкция предполагает процесс восстановления микроструктуры, морфология которой соответствует неким заданным свойствам. На основе набора морфологических данных по единственному образцу структуры можно создать бесконечное количество новых структур, не повторяющих в точности исходную геометрию, но идентичных по своим морфологическим свойствам. Это означает, что статистические дескрипторы для этих структур будут одинаковыми.

Необходимые для создания структур, идентичных исходным, статистические дескрипторы зависят от параметров структуры, информация о которых должна быть сохранена. Существует ряд базовых параметров, которые сохраняются в процессе реконструкции морфологии неоднородных сред. В первую очередь, это объемная доля фаз. Далее, в зависимости от типа геометрии, могут сохраняться размеры кластеров, минимальный размер локальной фазы и прочие. Таким образом, для каждого типа структур можно подобрать набор статистических дескрипторов, характеризующих те или иные взаимодействия, и которые в наибольшей мере эффективны для восстановления их исходных характеристик.

Одним из наиболее широко используемых статистических дескрипторов является корреляционная функция. С точки зрения геометрии она

представляет вероятность нахождения двух концов отрезка фиксированной длины в одной и той же фазе. Эта функция также часто используется в экспериментальных методах определения внутренней структуры неоднородной среды, что делает ее значимой при обработке исходных экспериментально полученных изображений. Существуют ряд неоднородных сред (например, с периодической структурой), для которых двухточечной моментных функции достаточно для достоверного однозначного задания геометрии. Тем не менее, для описания свойств большинства структур одной такой функции недостаточно. Многоточечные статистические дескрипторы, такие как вероятностные функции и многоточечные моментные функции, позволяют ускорить процесс реконструкции структуры.

7.1. Реконструкция микроструктуры на основе оптимизационных алгоритмов

Задача восстановления случайной структуры неоднородной среды по некому референсному объекту может решаться с использованием оптимизации на основе статистических дескрипторов. Статистические дескрипторы могут быть использованы как входные данные для постановки задачи оптимизации, и также могут быть инструментами для оценки полученного результата. В данной работе установлено, что для достижения качественных результатов при восстановлении представительных объемов с использованием оптимизации структуры в общем случае достаточно корреляционной функции, функции линейного пути, а также одной из многоточечных функций.

Реконструкция статистически эквивалентной микроструктуры рассматривается как задача минимизации, которая решается с помощью корректировки некоторой произвольной начальной структуры с такой же объемной долей, что и эталонная структура, с целью минимизации

энергетической функции, которая измеряет разницу между выбранными статистическими дескрипторами эталонной и реконструируемой среды. При этом необходимо, чтобы представительные объемы эталонной и реконструируемой среды имели дискретное представление, то есть отображались в виде совокупности отдельных равноразмерных пикселей (в двумерном случае) или вокселей (в трехмерном), каждый из которых характеризуется присутствием исключительно одной из фаз неоднородной среды. Корректировка начальной структуры выполняется путем замены местами дискретных элементов (пикселей или вокселей), принадлежащих различным фазам, в начальной структуре, оценкой энергетической функции для нового варианта структуры и минимизации тем самым разницы статистических дескрипторов между эталонной и реконструируемой структурой. Для использования полезной информации, содержащейся в различных дескрипторах, в процессе реконструкции можно использовать составной вид энергетической функции, учитывающий произвольное количество различных статистических функций. Процесс реконструкции, таким образом, в общем виде состоит из следующих этапов:

- 1) Создание начального двумерного или трехмерного дискретного изображения с сохранением объемной долей эталонного изображения.
- 2) Замена местами состояния двух произвольных дискретных элементов. Это гарантирует сохранение объемной доли структуры, поскольку количество дискретных элементов, относящихся к каждой фазе, остается неизменным.
- 3) Расчет энергетической функции для оценки разницы между новой и эталонной структурой.
- 4) Повторение процедуры начиная со второго шага до достижения допустимо малого значения энергетической функции.

В зависимости от используемых методов, данная процедура может быть модифицирована для ускорения процесса минимизации. Например, при

использовании совокупности статистических дескрипторов для экономии вычислительных ресурсов на начальной стадии оптимизации могут в энергетической функции быть использованы лишь один статистический дескриптор. Оставшиеся подключаются позже при достижении определенной скорости сходимости. В данной работе такой подход был успешно апробирован для двумерных структур, когда первоначально оптимизация начиналась с использованием одной только вероятностной функции или функции линейного пути. Установлено также, что для изотропных материалов статистические дескрипторы могут быть получены только в нескольких направлениях, а не во всех возможных.

Энергетическая функция, используемая в задачах реконструкции структур, выражается в виде:

$$E = \sum_{i=1}^m \omega_i |\bar{f}_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) - f_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)|^2, \quad (7.1)$$

где ω_i - весовые коэффициенты, $\bar{f}_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ статистические дескрипторы эталонной структуры, $f_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ статистические дескрипторы реконструируемой структуры.

На основе одной эталонной структуры может быть получено бесконечное количество эквивалентных. Предложенный оптимизационный подход может быть успешно использован как для двухфазных, так и для многофазных структур. Как было показано, вышеописанный разработанный оригинальный подход позволяет уменьшить начальное значение энергетической функции и ускорить процесс оптимизации за счет меньшей исходной разницы между статистическими дескрипторами для реконструируемой и эталонной структуры. Для реализации данного подхода были использованы программные средства пакета Wolfram Mathematica [166].

Реализованные оптимизационные подходы позволяют использовать двумерные изображения случайных сред (например, полученные

экспериментально) для реконструкции статистически эквивалентных трехмерных геометрических регионов, что является крайне важным для различных задач механики. Процедура реконструкции апробирована на тестовых примерах модельных неоднородных сред. Опробованы и отработаны методы реконструкции с использованием различных статистических дескрипторов и их сочетаний (рисунки 7.1–7.5).

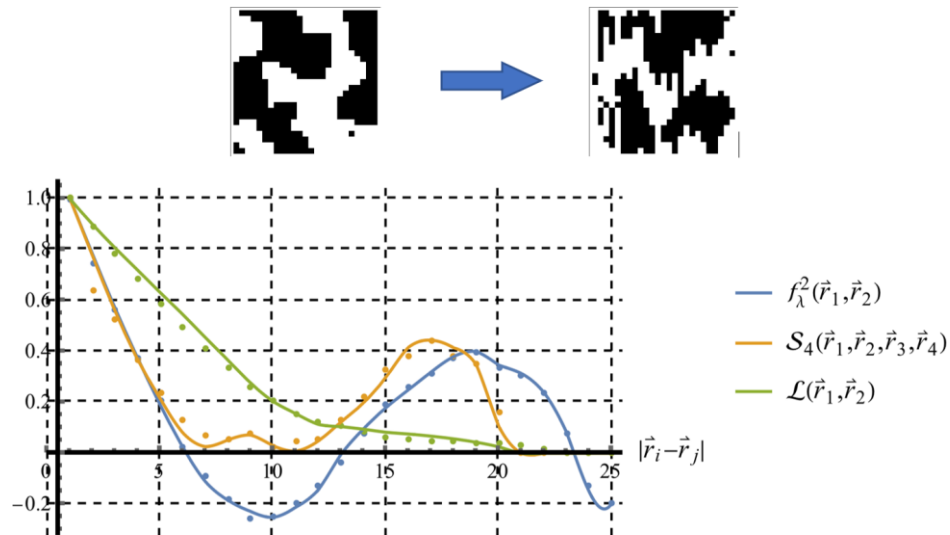


Рисунок 7.1 – Пример реализации алгоритма реконструкции структуры с использованием корреляционной функции, вероятностной функции четвертого порядка и функции линейного пути. Сплошными линиями обозначены интерполированные эталонные функции, точками – реконструированные значения дескрипторов

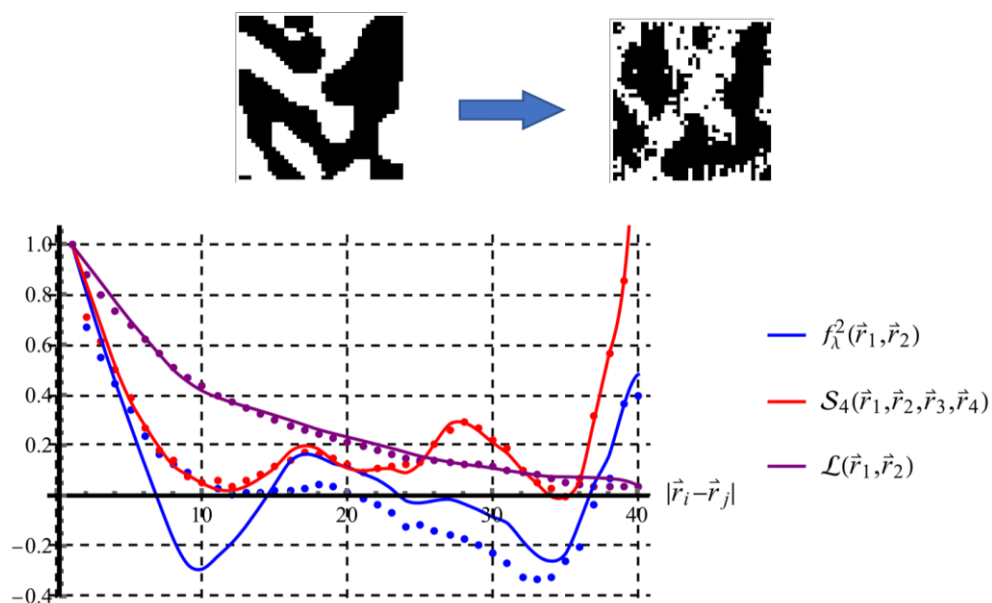


Рисунок 7.2 – Пример реализации алгоритма реконструкции структуры с использованием вероятностной функции четвертого порядка и функции линейного пути. Сплошными линиями обозначены интерполированные эталонные функции, точками – реконструированные значения дескрипторов.

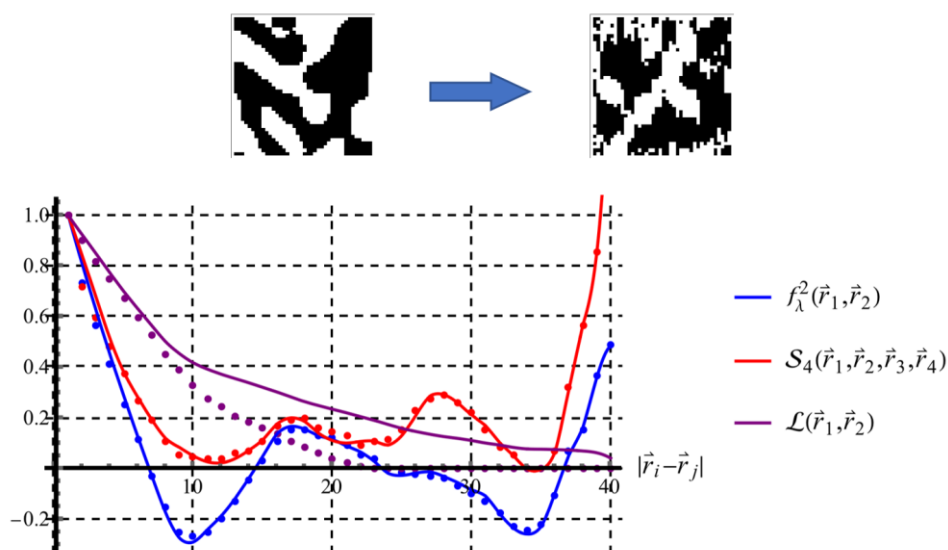


Рисунок 7.3 – Пример реализации алгоритма реконструкции структуры с использованием вероятностной функции четвертого порядка и корреляционной функции. Сплошными линиями обозначены интерполированные эталонные функции, точками – реконструированные значения дескрипторов

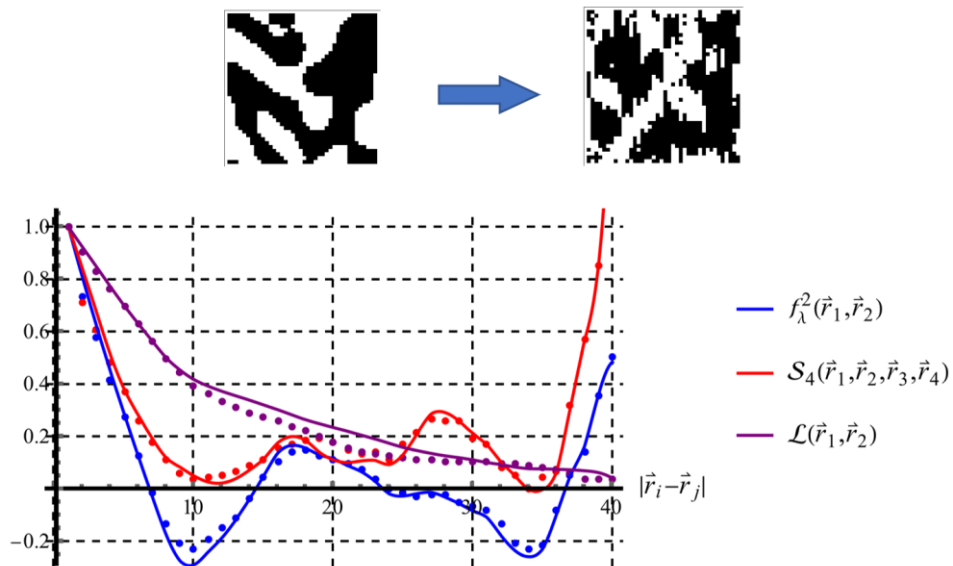


Рисунок 7.4 – Пример реализации алгоритма реконструкции структуры с использованием корреляционной функции, вероятностной функции четвертого порядка и функции линейного пути. Сплошными линиями обозначены интерполированные эталонные функции, точками – реконструированные значения дескрипторов

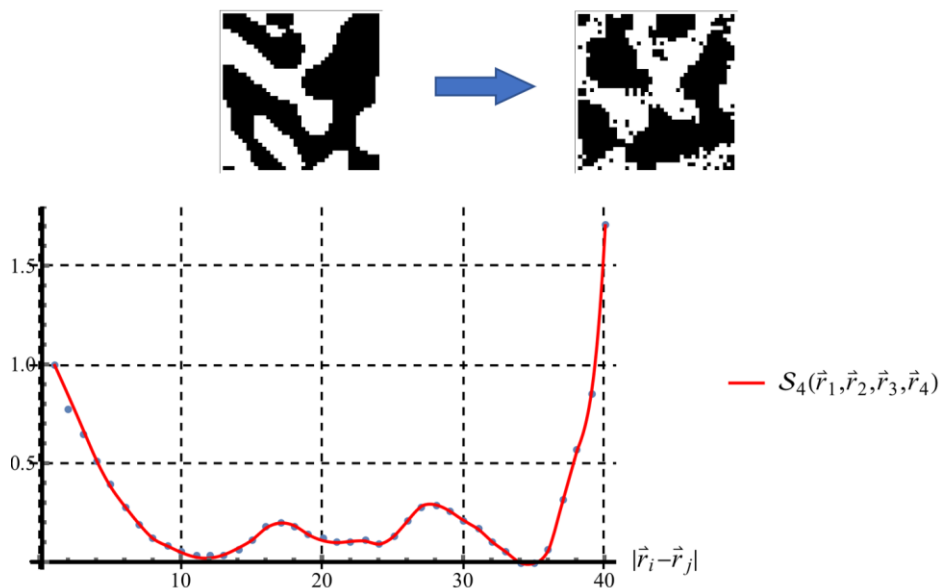


Рисунок 7.5 – Пример реализации алгоритма реконструкции структуры с использованием вероятностной функции четвертого порядка. Сплошными линиями обозначены интерполированные эталонные функции, точками – реконструированные значения

Установлено, что для реконструкции представительных объемов неоднородных сред более эффективно будут работать те дескрипторы, которые наиболее чувствительны к изменению параметров морфологии конкретной неоднородной среды. На основе этого разработана модификация оптимизационного алгоритма, позволяющего сократить вычислительные ресурсы, необходимые для реконструкции [166].

7.2. Реконструкция микроструктуры с помощью нейронных сетей с верификацией морфологических характеристик

Разработан алгоритм использования статистических и физических дескрипторов для контроля морфологических свойств при реконструировании статистически эквивалентной 3D-структуры из 2D-изображения на основе нейронной сети. Для генерации исходного двумерного или трехмерного представительного объема, на основе которого в дальнейшем будет произведена реконструкция, был разработан метод, основанный на анализе не одной, а множества эталонных структур. В случае, когда доступны данные о многих эталонных структурах (например, это могут быть двумерные срезы трехмерной геометрии, полученные при экспериментальном исследовании внутренней структуры материалов), они могут быть использованы для создания выборки, которая может быть использована для обучения нейронной сети. Обученная таким образом нейронная сеть способна оценить распределение фаз в структуре и предложить вариант начального приближения реконструируемой среды, с характеристиками, максимально приближенными к эталонным изображениям.

Алгоритм стохастической реконструкции трехмерной структуры материала по двумерному срезу основан на принципе генеративно-состязательного обучения [120]. Вклад предложенного алгоритма состоит во введении инвариантной относительно преобразований ошибки

реконструкции, которая повышает стабильность обучения нейронной сети и качество генерируемых структур. Тестирование модели проводится на данных пористых материалов открытого и закрытого типов.

Суть разработанного метода заключается в обучении нейронной сети на основе данных о внутренней структуры эталонного двумерного или трехмерного изображения. В зависимости от имеющейся выборки, обученная нейронная сеть способна к генерации новой структуры, статистические характеристики которой соответствуют или близки к эталонным. В данной работе применен метод реконструирования статистически эквивалентной 3D-структуры из 2D-изображения на основе вариационный автокодировщика, в комбинации с генеративно-состязательной сетью (VAE-GAN). Имея достаточный объем данных, описывающий исследуемую пористую среду, обученная модель способна извлекать полезные признаки из входного среза в виде закодированного скрытого вектора и на его основе реконструировать трехмерную структуру, с поверхности которой предположительно был взят срез.

Для рассматриваемой в данной работе задачи предлагается использовать методы статистической оценки микроструктуры материала. Больше всего для целей исследования подходят двухточечная корреляционная функция и функция линейного пути, которые рассматривались отдельно для каждого из ортогональных направлений моделей. Также в процессе реконструкции необходимо учитывать объемную долю материалов, эффективную пористость – отношение объема пустого пространства к заполненному, извилистость и размер пор.

Для иллюстрации работы алгоритма модель обучалась на наборе данных материалов с порами открытого и закрытого типа. Эти наборы отличаются подходами к их созданию и степенью нелинейности их структурных корреляционных функций.

1) Микроструктуры с порами открытого типа

Пусть $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$, тогда первый этап процесса генерации одной структуры заключается в инициализации равномерно распределенных случайных величин:

$$f_{uniform} = \sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{i=1}^n \cos\left(\frac{20}{A} \boldsymbol{\zeta} \cdot \mathbf{r} + \eta\right), \quad (7.2)$$

где $\boldsymbol{\zeta} = \{\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3\}$, $\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3 \sim U(-0.5\pi, 0.5\pi)$, $\eta \sim U(0, 2\pi)$. На втором этапе строятся неявные области $f_{uniform} \leq \chi$ и $f_{normal} \leq \chi$ для $x, y, z \in [0, A]$ и проводится вокселизация с шагом $64 \times 64 \times 64$ (рисунок 7.6).

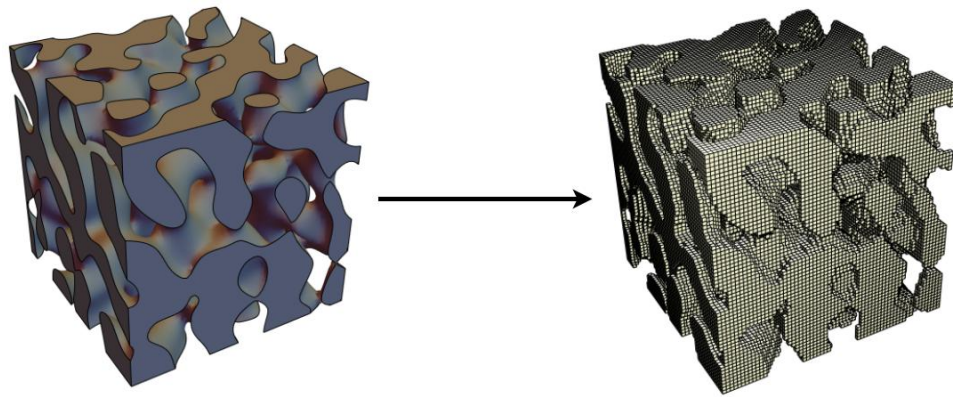


Рисунок 7.6 – Преобразование непрерывного геометрического представления (слева) в 3D массив, состоящий из объемных элементов (справа)

Выбранные константы: $A = 20$, $n = 20$, $\chi = 0$, где увеличение (уменьшение) A , n и χ приводит к увеличению (уменьшению) размера, нелинейности и объемной доли структуры соответственно.

2) Микроструктуры с порами закрытого типа

Пусть R_{min} – минимальный радиус сферы и R_{max} – максимальный радиус сферы, тогда процесс генерации структуры с порами закрытого типа заключается в последовательном включении сфер радиуса $R \sim U(R_{min}, R_{max})$ в куб с длиной ребра A до тех пор, пока это возможно и пористость куба $P < P_{max}$, где P_{max} – максимально допустимая пористость. Генерация происходит

таким образом, чтобы не допустить пересечение вкладываемых сфер между собой. Выбранные константы: $A = 20$, $R_{min} = 1$, $R_{max} = 2$ и $P_{max} = 0.25$.

Каждый набор состоял из 600 структур, где 350 отводится под обучение, а 150 под валидацию. По срезу каждой из оставшихся 100 структур, используя обученную нейронную сеть, генерировались 10 структур и вычислялась статистика критериев качества на полученных 1000 реконструкциях.

При анализе структурных статистических дескрипторов видно, что график функции линейного пути для исходных и реконструированных структур во всех случаях согласуется практически идеально (рисунок 7.7). Для небольших h двухточечная корреляционная функция (рисунок 7.8) тоже сохраняет зависимость, потому что ошибка по объемной доле мала, но для больших h на наборе данных «Uniform» наблюдается рассинхронизация. Это связано с более высокой степенью нелинейности корреляционных функций структур, составляющих данный набор. Еще одним наблюдением является то, что корреляционные функции реконструированных структур имеет наилучшее соответствие с корреляционными функциями оригинальных структур вдоль той оси, по которой брались срезы для обучения.

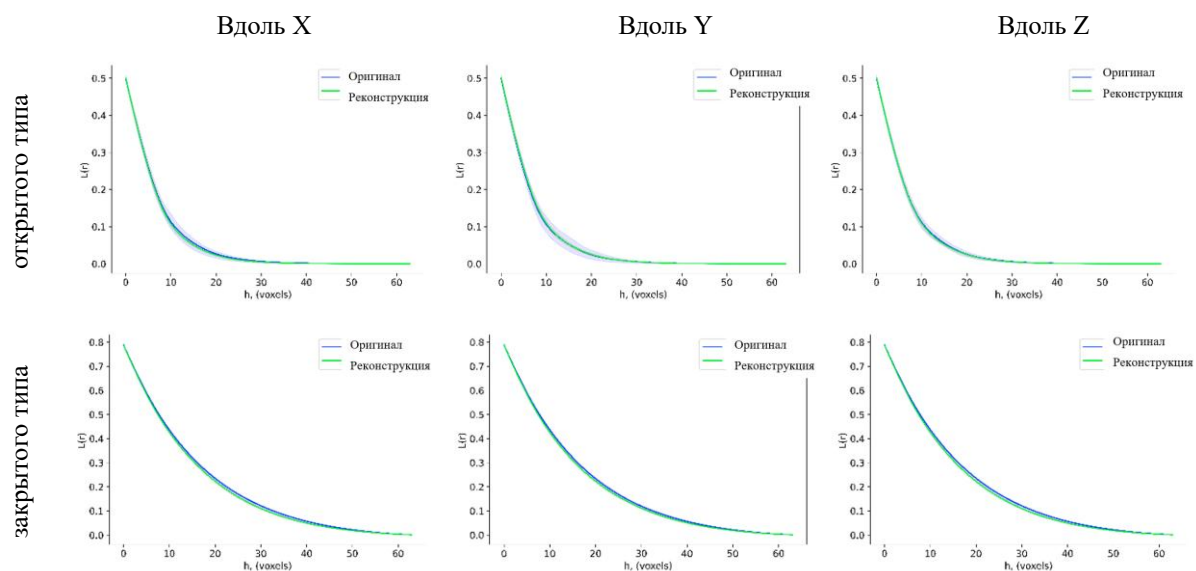


Рисунок 7.7 – Функции линейного пути вдоль трех ортогональных направлений (жирная линия обозначает среднее по выборке, а закрашенная область – интерквартильный размах)

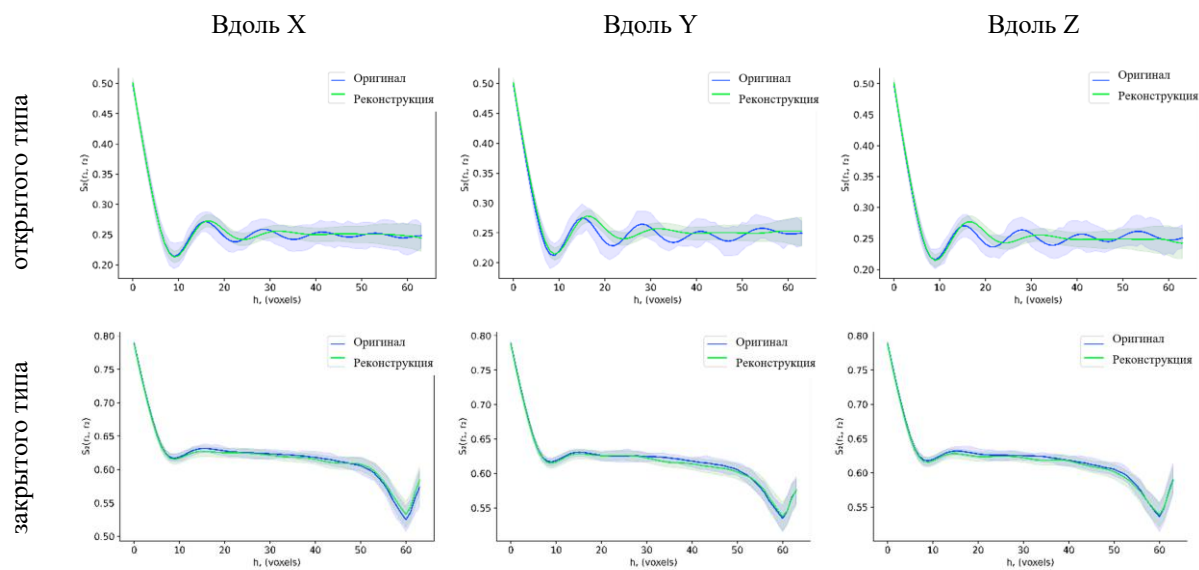


Рисунок 7.8 – Двухточечные корреляционные функции вдоль трех ортогональных направлений (жирная линия обозначает среднее по выборке, а закрашенная область – интерквартильный размах)

Полученные результаты говорят о применимости предложенного подхода к решению задач стохастической реконструкции неоднородных и пористых сред. Разработанная методика верификации позволяет решить проблемы классических методов реконструкции, а также избавиться от недостатков поэлементных ошибок.

Для анализа механического отклика изучаемых структур первая фаза предполагалась с линейно-упругим изотропным поведением, смоделированным с использованием полилактида со следующими свойствами: модуль Юнга 2620 МПа и коэффициент Пуассона 0.36. Вторая фаза представляла собой поры. Все геометрии были дискретизированы в модели конечных элементов с использованием двухступенчатой процедуры (рисунок 7.9). На первом этапе создавалась воксельная модель; на втором этапе эта модель преобразовывалась в сетку тетраэдрических элементов с использованием алгоритма Dual Marching Cubes [421]. Максимальный размер элемента составлял 0.03 мм.

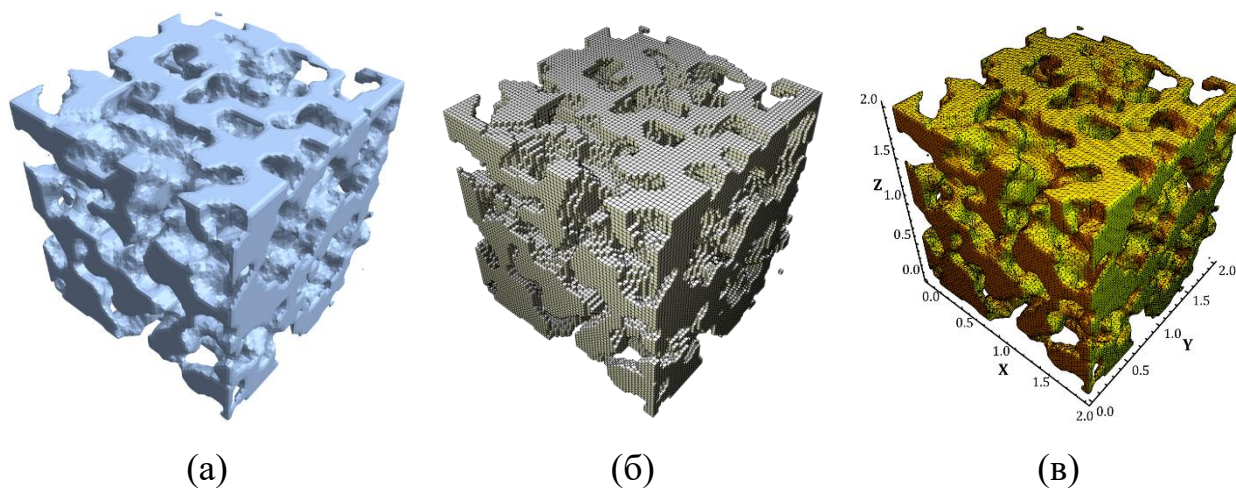


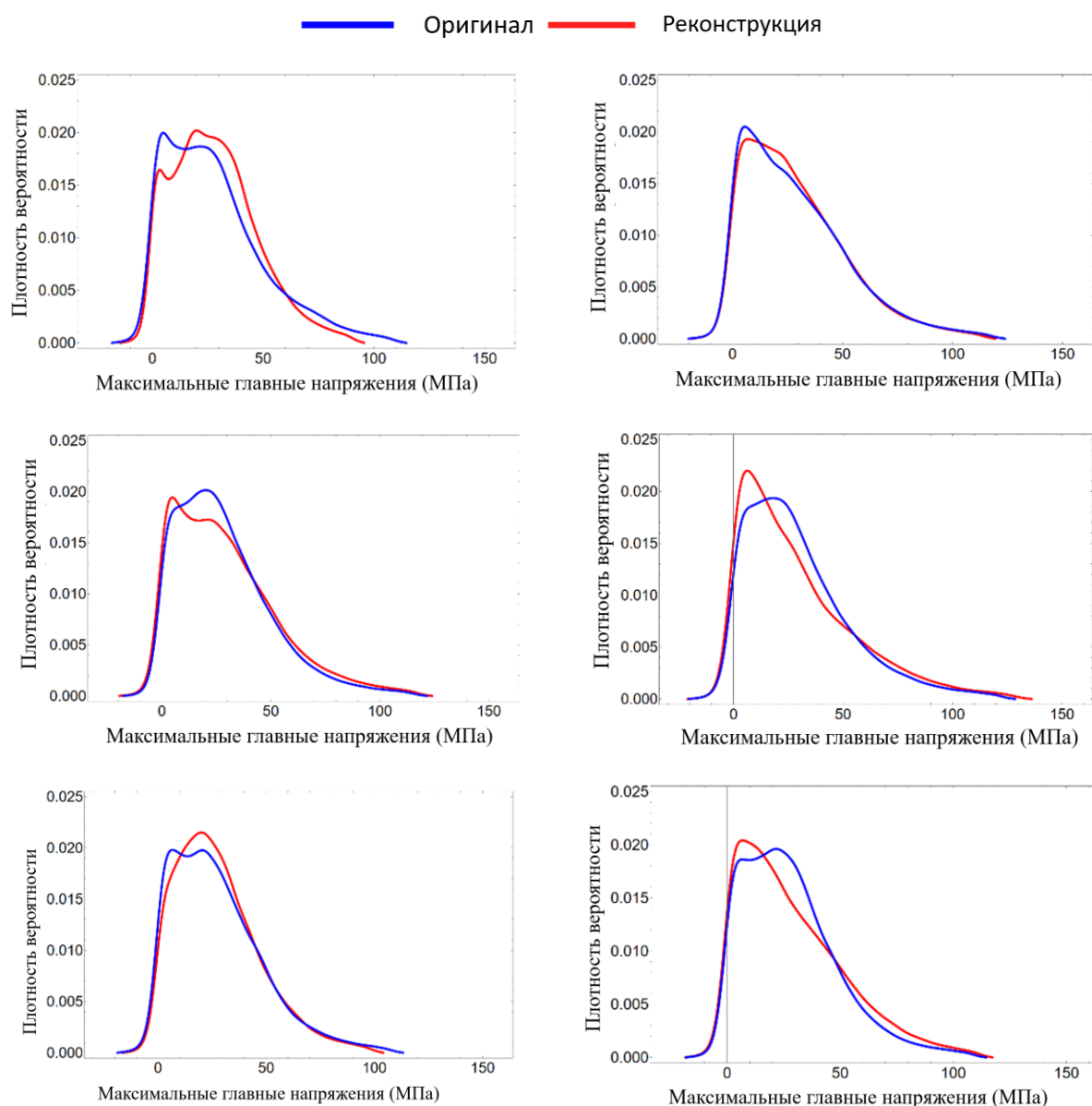
Рисунок 7.9 – Двунепрерывная структура (а) исходная геометрическая модель; (б) воксельная дискретизация; (в) тетраэдральная дискретизация

Механический отклик оригинальных и реконструированных моделей с граничными условиями в виде растягивающей нагрузки был численно

проанализирован в SIMULIA Abaqus. Граничные условия включали жестко фиксированную нижнюю грань, в то время как к верхней грани было приложено одноосное растяжение с силой 500 Н.

Распределения плотности вероятности максимальных главных напряжений реализованных в КЭ-моделях в результате растягивающей нагрузки в 50 Н представлены в виде сглаженных гистограмм в таблице 7.1.

Таблица 7.1 – Графики плотности вероятности максимальных главных напряжений для оригинальных и реконструированных структур с порами открытого типа



Распределения плотности вероятности для всех исследованных структур были близки к скошенному нормальному распределению. Напряжения, возникающие в моделях обоих типов, находились в одном диапазоне. Сглаженные гистограммы для оригинальных моделей и реконструированных моделей были практически идентичны. Кроме того, в большинстве случаев график плотности вероятности максимальных главных напряжений был унимодальным. Это означает, что реконструированные модели смогли воспроизвести напряженно-деформированное состояние оригинальных моделей в рамках упругой формулировки.

При использовании статистических дескрипторов для реконструкции неоднородной среды нерешенной задачей остается поиск баланса между вычислительной эффективностью подхода и обеспечения адекватной статистической эквивалентности. Включение большего числа статистических функций в процессе оптимизации обеспечивает большую точность, но значительно увеличивает требуемые для реконструкции вычислительные ресурсы. Текущие исследования в данной области посвящены поиску компромисса между качеством реконструкции и вычислительной стоимостью алгоритмов. Во многих опубликованных работах было показано, что двухточечные корреляционные функции могут быть полезны только для приблизительной реконструкции, тогда как для получения лучших результатов необходимы другие группы статистических дескрипторов. Было также показано, что использование двумерных изображений в качестве эталона для реконструкции трехмерных представительных объемов ограничивает возможности рассмотрения некоторых морфологических признаков, специфичных для трехмерных структур. Это потребовало введения дополнительных функций, способных фиксировать специфику геометрии для выполнения более сложного анализа, таких как, например, кластерная функция, которая дает вероятность того, что две точки будут в одном и том же кластере одной из фаз. Среди других – функция линейного пути и функция

«ближайших соседей», которые использовались для более точной статистической реконструкции. Полученные результаты опубликованы в статьях [120, 128].

Предложенный в данной работе подход позволяет избежать вычислительных затрат, связанных с использованием дополнительных статистических дескрипторов в процессе реконструкции трехмерных неоднородных структур.

Практическое применение разработанной методики может быть востребовано в биомедицинских приложениях. Так, при проектировании костных имплантатов важно соответствие морфологии имплантата нативной ткани. Для этого структура имплантата может быть сгенерирована с использованием предложенного подхода, когда в качестве эталонной структуры используется полученной методами компьютерной томографии трехмерное изображение нативной ткани.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработан комплекс новых математических моделей, методов, алгоритмов и программ, определяющих взаимосвязь между морфологией и механическим откликом неоднородных сред на основе параметров их микроструктуры.

2. Предложены новые решения задач локализации и гомогенизации отклика неоднородных сред на основе стохастического подхода с учетом морфологических особенностей и с возможностью управления точностью за счет порядка учитываемых многоточечных взаимодействий.

3. На основе созданных моделей определены зависимости между характером механического отклика неоднородных сред и их морфологическими параметрами, которые могут быть использованы для создания материалов с заранее определенным набором свойств и оценки вероятности их разрушения.

4. Созданы подходы для верификации моделей на основе данных о распределенных полях и локальных значениях деформаций, полученных с использованием методов корреляции цифровых изображений и волоконно-оптических датчиков деформаций.

5. Продемонстрирована возможность практического использования инструментария многоточечных стохастических моделей для решения задач проектирования, дизайна и оптимизации структур с учетом механического отклика и морфологических характеристик.

6. С использованием многоточечных статистических дескрипторов, а также на основе многопараметрической оптимизации и генеративных нейронных сетей разработаны алгоритмы для реконструкции, адаптации и поиска эквивалентных неоднородных сред.

7. На основе разработанных математических моделей и методов созданы и апробированы вычислительные алгоритмы и программные инструменты для решения задач механики и дизайна неоднородных сред с учетом морфологии микроструктуры.

Список литературы

1. Fullwood D. T. Microstructure sensitive design for performance optimization / D. T. Fullwood, S. R. Niezgod, B. L. Adams, S. R. Kalidindi // *Progress in Materials Science*. – 2010. – Vol. 55. – № 6. – P. 477-562.
2. Gupta A. Structure-property linkages using a data science approach: Application to a non-metallic inclusion/steel composite system / A. Gupta, A. Cecen, S. Goyal [et al.] // *Acta Materialia*. – 2015. – Vol. 91. – P. 239-254.
3. Zhou X. Y. Perturbation-based stochastic multi-scale computational homogenization method for the determination of the effective properties of composite materials with random properties / X. Y. Zhou, P. D. Gosling, C. J. Pearce [et al.] // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 2016. – Vol. 300. – P. 84-105.
4. Agoras M. Homogenization estimates for multi-scale nonlinear composites / M. Agoras, P. Ponte Castañeda // *European Journal of Mechanics, A/Solids*. – 2011. – Vol. 30. – № 6. – P. 828-843.
5. Le B. A. Computational homogenization of nonlinear elastic materials using neural networks / B. A. Le, J. Yvonnet, Q. C. He // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. – 2015. – Vol. 104. – № 12. – P. 1061-1084.
6. Drach B. Comparison of full field and single pore approaches to homogenization of linearly elastic materials with pores of regular and irregular shapes / B. Drach, I. Tsukrov, A. Trofimov // *International Journal of Solids and Structures*. – 2016. – Vol. 96. – P. 48-63.
7. Ghossein E. Homogenization models for predicting local field statistics in ellipsoidal particles reinforced composites: Comparisons and validations / E. Ghossein, M. Lévesque // *International Journal of Solids and Structures*. – 2015. – Vol. 58. – P. 91-105.
8. Fullwood D. T. A strong contrast homogenization formulation for multi-phase

- anisotropic materials / D. T. Fullwood, B. L. Adams, S. R. Kalidindi // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2008. – Vol. 56. – № 6. – P. 2287-2297.
9. Rémond Y. Applied RVE Reconstruction and Homogenization of Heterogeneous Materials. Appl. RVE Reconstr. Homog. Heterog. Mater. / Y. Rémond, S. Ahzi, M. Baniassadi, H. Garmestani. – Hoboken, NJ, USA : Wiley, 2016. – 1-186 p.
10. Kachanov M. Effective Properties of Heterogeneous Materials : Solid Mechanics and Its Applications. Vol. 193 / M. Kachanov, I. Sevostianov; eds. M. Kachanov, I. Sevostianov. – Dordrecht : Springer Netherlands, 2013. – 393 p.
11. Torquato S. Morphology and effective properties of disordered heterogeneous media / S. Torquato // *International Journal of Solids and Structures*. – 1998. – Vol. 35. – № 19. – P. 2385-2406.
12. Klusemann B. Homogenization methods for multi-phase elastic composites with non-elliptical reinforcements: Comparisons and benchmarks / B. Klusemann, H. J. Böhm, B. Svendsen // *European Journal of Mechanics, A/Solids*. – 2012. – Vol. 34. – P. 21-37.
13. Ponte Castañeda P. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuations: II—applications / P. Ponte Castañeda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2002. – Vol. 50. – № 4. – P. 759-782.
14. Xu X. F. Stochastic homogenization of random elastic multi-phase composites and size quantification of representative volume element / X. F. Xu, X. Chen // *Mechanics of Materials*. – 2009. – Vol. 41. – № 2. – P. 174-186.
15. Pierard O. Mean-field homogenization of multi-phase thermo-elastic composites: A general framework and its validation / O. Pierard, C. Friebe, I. Doghri // *Composites Science and Technology*. – 2004. – Vol. 64. – № 10-11. – P. 1587-1603.
16. He Z. Multiscale homogenization and localization of materials with hierarchical porous microstructures / Z. He, G. Wang, M. J. Pindera // *Composite Structures*. –

2019. – Vol. 222. – № April. – P. 110905.

17. Kalidindi S. R. Elastic properties closures using second-order homogenization theories: Case studies in composites of two isotropic constituents / S. R. Kalidindi, M. Binci, D. Fullwood, B. L. Adams // *Acta Materialia*. – 2006. – Vol. 54. – № 11. – P. 3117-3126.

18. Liu R. Machine learning approaches for elastic localization linkages in high-contrast composite materials / R. Liu, Y. C. Yabansu, A. Agrawal [et al.] // *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. – 2015. – Vol. 4. – № 1. – P. 192-208.

19. Yabansu Y. C. Calibrated localization relationships for elastic response of polycrystalline aggregates / Y. C. Yabansu, D. K. Patel, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2014. – Vol. 81. – P. 151-160.

20. Yabansu Y. C. Representation and calibration of elastic localization kernels for a broad class of cubic polycrystals / Y. C. Yabansu, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2015. – Vol. 94. – P. 26-35.

21. Fast T. Formulation and calibration of higher-order elastic localization relationships using the MKS approach / T. Fast, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2011. – Vol. 59. – № 11. – P. 4595-4605.

22. Landi G. Multi-scale modeling of elastic response of three-dimensional voxel-based microstructure datasets using novel DFT-based knowledge systems / G. Landi, S. R. Niezgoda, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol. 58. – № 7. – P. 2716-2725.

23. Pierard O. Micromechanics of elasto-plastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions / O. Pierard, C. González, J. Segurado [et al.] // *International Journal of Solids and Structures*. – 2007. – Vol. 44. – № 21. – P. 6945-6962.

24. Garcea S. C. X-ray computed tomography of polymer composites / S. C. Garcea, Y. Wang, P. J. Withers // *Composites Science and Technology*. – 2018. – Vol. 156. – P. 305-319.

25. Maire E. Quantitative X-ray tomography / E. Maire, P. J. Withers // International Materials Reviews. – 2014. – Vol. 59. – № 1. – P. 1-43.
26. Nikishkov Y. Measurement of voids in composites by X-ray Computed Tomography / Y. Nikishkov, L. Airoidi, A. Makeev // Composites Science and Technology. – 2013. – Vol. 89. – P. 89-97.
27. Li H. Reconstruction of heterogeneous materials via stochastic optimization of limited-angle X-ray tomographic projections / H. Li, N. Chawla, Y. Jiao // Scripta Materialia. – 2014. – Vol. 86. – P. 48-51.
28. Adams B. L. Electron Backscatter Diffraction Microscopy and Basic Stereology / B. L. Adams, S. R. Kalidindi, D. T. Fullwood // Microstructure Sensitive Design for Performance Optimization. – Elsevier, 2013. – P. 341-371.
29. Karak N. Fundamentals of Nanomaterials and Polymer Nanocomposites / N. Karak // Nanomaterials and Polymer Nanocomposites. – Elsevier, 2019. – P. 1-45.
30. Rollett A. D. Three-Dimensional Characterization of Microstructure by Electron Back-Scatter Diffraction / A. D. Rollett, S.-B. Lee, R. Campman, G. S. Rohrer // Annual Review of Materials Research. – 2007. – Vol. 37. – № 1. – P. 627-658.
31. Borbély A. Three-dimensional characterization of the microstructure of a metal–matrix composite by holotomography / A. Borbély, F. . Csikor, S. Zabler [et al.] // Materials Science and Engineering: A. – 2004. – Vol. 367. – № 1-2. – P. 40-50.
32. Bostanabad R. Computational microstructure characterization and reconstruction: Review of the state-of-the-art techniques / R. Bostanabad, Y. Zhang, X. Li [et al.] // Progress in Materials Science. – 2018. – Vol. 95. – P. 1-41.
33. Bargmann S. Generation of 3D representative volume elements for heterogeneous materials: A review / S. Bargmann, B. Klusemann, J. Markmann [et al.] // Progress in Materials Science. – 2018. – Vol. 96. – P. 322-384.
34. Аннин Б. Д. Поведение материалов в условиях сложного нагружения / Б. Д. Аннин, В. М. Жигалкин. – Новосибирск : Издательство СО РАН, 1999. – 342 с.
35. Бахвалов Н. С. Осреднение процессов в периодических средах / Н. С.

Бахвалов, Г. П. Панасенко. – Москва : Наука, 1984.

36. Балохонов Р. Р. Иерархическое моделирование неоднородной деформации и разрушения материалов композиционной структуры / Р. Р. Балохонов, В. А. Романова // Физическая мезомеханика. – 2005. – Т. 8. – № 2. – С. 73-79.

37. Болотин В. В. К расчету макроскопических постоянных сильно изотропных композиционных материалов / В. В. Болотин, В. К. Москаленко // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. – 1967. – № 3. – С. 106-111.

38. Болотин В. В. Задача об определении упругих постоянных микронеоднородной среды / В. В. Болотин, В. Н. Москаленко // Журнал прикл. механики и техн. физики. – 1968. – № 1. – С. 66-72.

39. Ванин Г. А. Микромеханика композиционных материалов / Г. А. Ванин. – Киев : Наукова думка, 1985. – 302 с.

40. Ломакин В. А. Статистические задачи механики твердых деформируемых тел / В. А. Ломакин. – М. : Наука, 1970. – 139 с.

41. Lomakin E. V. Nonlinear anisotropic elasticity for laminate composites / E. V. Lomakin, B. N. Fedulov // Meccanica. – 2015. – Т. 50. – № 6. – С. 1527-1535.

42. Ломакин Е. В. Моделирование локально-функциональных свойств материала, повреждённого полями дефектов / Е. В. Ломакин, С. А. Лурье, П. А. Белов, Л. Н. Рабинский // Доклады Академии наук. – 2017. – Т. 62. – № 1. – С. 46-49.

43. Ломакин Е. В. Конструкционные элементы на основе метаматериалов / Е. В. Ломакин, С. А. Юргенсон, Б. Н. Федулов, А. Н. Федоренко // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – Т. 4. – С. 211-219.

44. Solyaev Y. Eshelby integral formulas in second gradient elasticity / Y. Solyaev, S. A. Lurie // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2020. – Vol. 11. – № 2. – P. 99-107.

45. Belov P. A. Development of the “Separated Anisotropy” Concept in the Theory

of Gradient Anisotropic Elasticity / P. A. Belov, S. A. Lurie // Mechanics of Composite Materials. – 2021. – Vol. 57. – № 4. – P. 427-438.

46. Гаришин О. К. Геометрический синтез и исследование случайных структур / О. К. Гаришин. – Екатеринбург: УрО РАН, 1997. – 48-81 с.

47. Lurie S. A. Symmetry and applied variational models for strain gradient anisotropic elasticity / S. A. Lurie, P. A. Belov, Y. O. Solyaev [et al.] // Nanoscience and Technology. – 2021. – Vol. 12. – № 1. – P. 75-99.

48. Lurie S. Integral Eshelby's Formulas for Generalized Continuum and Couple-Field Theories / S. Lurie, Y. Solyaev // Advanced Structured Materials. – 2023. – Vol. 195. – P. 385-397.

49. Lurie S. A. Coupled problems of gradient thermoelasticity for periodic structures / S. A. Lurie, D. B. Volkov-Bogorodskii, H. Altenbach [et al.] // Archive of Applied Mechanics. – 2023. – Vol. 93. – № 1. – P. 23-39.

50. Lurie S. A. Analytical solution of stationary coupled thermoelasticity problem for inhomogeneous structures / S. A. Lurie, D. B. Volkov-Bogorodskii, P. A. Belov // Mathematics. – 2022. – Vol. 10. – № 1.

51. Панин В. Е. Основы физической мезомеханики / В. Е. Панин // Физическая мезомеханика. – 1998. – Vol. 1. – P. 5-22.

52. Победря Б. Е. Механика композиционных материалов / Б. Е. Победря. – Изд-во МГУ, 1984. – 336 р.

53. Psakhie S. G. Development of multiscale approach to modeling mechanical response of heterogeneous materials / S. G. Psakhie, E. V Shilko, S. V Astafurov, V. L. Popov // Computational Materials Science. – 2019. – Vol. 158. – P. 1-10.

54. Psakhie S. G. Modeling of heterogeneous elastic materials by the multiscale hp-adaptive finite element method / S. G. Psakhie, E. V Shilko, S. V Astafurov, V. L. Popov // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 125. – P. 1-9.

55. Psakhie S. G. Accelerated multiscale mechanics modeling in a deep learning framework / S. G. Psakhie, E. V Shilko, S. V Astafurov, V. L. Popov //

Computational Materials Science. – 2014. – Vol. 95. – P. 1-9.

56. Psakhie S. G. Generalized multiscale finite-element method (GMsFEM) for elastic wave propagation in heterogeneous, anisotropic media / S. G. Psakhie, E. V Shilko, S. V Astafurov, V. L. Popov // Computational Materials Science. – 2012. – Vol. 58. – P. 1-9.

57. Psakhie S. G. Discrete element approach to modeling heterogeneous elastic-plastic materials and media / S. G. Psakhie, E. V Shilko, S. V Astafurov, V. L. Popov // Computational Materials Science. – 2004. – Vol. 23. – P. 1-9.

58. Saushkin M. N. Method of calculating residual stresses in semicircular notches in a surface hardened hollow cylindrical specimen / M. N. Saushkin, V. P. Radchenko, A. Y. Kurov // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. – 2013. – Vol. 54. – № 4. – P. 644-650.

59. Романова В. А. Моделирование процессов деформации и разрушения в трехмерных структурно-неоднородных материалах / В. А. Романова, Р. Р. Балохонов, Е. С. Емельянова [et al.] // Физическая мезомеханика. – 2025. – Т. 28. – № 3. – С. 5-21.

60. Трусов П. В. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов / П. В. Трусов, В. Н. Ашихмин, А. И. Швейкин // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т. 15. – № 3. – С. 327-344.

61. Трусов П. В. Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах / П. В. Трусов, П. С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12. – № 5. – С. 65-72.

62. Трусов П. В. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели / П. В. Трусов, А. И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 5. – С. 5-30.

63. Трусов П. В. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели / П. В. Трусов, А. И. Швейкин //

Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 4. – С. 17-28.

64. Трусов П. В. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры / П. В. Трусов, А. И. Швейкин, Е. С. Нечаева, П. С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2012. – Vol. 15. – № 1. – С. 33-56.

65. Лифшиц И. М. К теории упругих свойств поликристаллов / И. М. Лифшиц, Л. Н. Розенцвейг // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1946. – № 11. – С. 967-980.

66. Лифшиц И. М. О построении тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченно упруго-анизотропной среды / И. М. Лифшиц, Л. Н. Розенцвейг // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1947. – Т. 17. – № 9. – С. 783.

67. Шермергор Т. Д. Теория упругости микroneоднородных сред / Т. Д. Шермергор. – М. : Наука, 1977.

68. Ставров В. П. Об упругих постоянных хаотически армированных пластиков / В. П. Ставров, В. Я. Долгих, С. Д. Волков // Механика полимеров. – 1967. – № 2. – С. 259-265.

69. Богачев И. Н. Статистическое металловедение / И. Н. Богачев, А. А. Вайнштейн, С. Д. Волков. – Москва : Металлургия, 1984. – 176 с.

70. Лапшина И. Ф. Распределение напряжений и деформаций в компонентах композиционных материалов / И. Ф. Лапшина, В. М. Мендельсон, С. Д. Волков // Проблемы прочности. – 1974. – № 12. – С. 31-35.

71. Калягин М. Ф. О законах распределения микроструктурных напряжений и деформаций / М. Ф. Калягин, С. Д. Волков // Проблемы прочности. – 1973. – № 11. – С. 21-25.

72. Волков С. Д. Статистическая механика композитных материалов / С. Д. Волков, В. П. Ставров. – Минск : Изд-во Белорус, гос. ун-та, 1978. – 208 с.

73. Волков С. Д. К теории упругости микroneоднородных сред / С. Д. Волков,

- В. Я. Долгих // Сборник научных трудов Курганского машиностроительного института. – Курган : Изд-во Кург. машиностр. ин-та, 1969. – Т. 12. – С. 3-9.
74. Kröner E. Modified Green Functions in the Theory of Heterogeneous and/or Anisotropic Linearly Elastic Media / E. Kröner // *Micromechanics and Inhomogeneity*. – 1989. – P. 197-211.
75. Kröner E. Statistical Modelling / E. Kröner // *Modelling Small Deformations of Polycrystals*. – 1986. – Vol. 174. – № 3. – P. 229-291.
76. Beran M. J. Application of statistical theories to heterogeneous materials / M. J. Beran // *Physica Status Solidi (a)*. – 1971. – Vol. 6. – № 2. – P. 365-384.
77. Torquato S. Effective stiffness tensor of composite media—I. Exact series expansions / S. Torquato // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2003. – Vol. 45. – № 9. – P. 1421-1448.
78. Torquato S. Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties / S. Torquato, H. Haslach // *Applied Mechanics Reviews*. – 2002. – Vol. 55. – № 4. – P. B62-B63.
79. Torquato S. Random Heterogeneous Media: Microstructure and Improved Bounds on Effective Properties / S. Torquato // *Applied Mechanics Reviews*. – 1991. – Vol. 44. – № 2. – P. 37.
80. Fullwood D. T. T. Gradient-based microstructure reconstructions from distributions using fast Fourier transforms / D. T. T. Fullwood, S. R. R. Kalidindi, S. R. R. Niezgoda [et al.] // *Materials Science and Engineering A*. – 2008. – Vol. 494. – № 1-2. – P. 68-72.
81. Kalidindi S. R. Application of the spectral methods of microstructure design to continuous fiber-reinforced composites / S. R. Kalidindi, J. R. Houskamp // *Journal of Composite Materials*. – 2007. – Vol. 41. – № 8. – P. 909-930.
82. Niezgoda S. R. Delineation of the space of 2-point correlations in a composite material system / S. R. Niezgoda, D. T. Fullwood, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2008. – Vol. 56. – № 18. – P. 5285-5292.

83. Fullwood D. T. Gradient-based microstructure reconstructions from distributions using fast Fourier transforms / D. T. Fullwood, S. R. Kalidindi, S. R. Niezgoda [et al.] // *Materials Science and Engineering A*. – 2008. – Vol. 494. – № 1-2. – P. 68-72.
84. Fullwood D. T. Microstructure sensitive design for performance optimization / D. T. Fullwood, S. R. Niezgoda, B. L. Adams, S. R. Kalidindi // *Progress in Materials Science*. – 2010. – Vol. 55. – № 6. – P. 477-562.
85. Buryachenko V. A. The overall elastoplastic behavior of multiphase materials with isotropic components / V. A. Buryachenko // *Acta Mechanica*. – 1996. – Vol. 119. – P. 93-117.
86. Buryachenko V. A. Local and Nonlocal Micromechanics of Heterogeneous Materials / V. A. Buryachenko. – Cham : Springer International Publishing, 2022.
87. Buryachenko V. A. Multiscale Mechanics of Nanocomposites / V. A. Buryachenko // *Micromechanics of Heterogeneous Materials*. – 2007. – P. 571-606.
88. Buryachenko V. A. Solution of general integral equations of micromechanics of heterogeneous materials / V. A. Buryachenko // *International Journal of Solids and Structures*. – 2014. – Vol. 51. – № 23-24. – P. 3823-3843.
89. Ghossein E. Numerical validation of analytical homogenization models for the case of randomly distributed and oriented ellipsoidal fibers reinforced composites / E. Ghossein. – 2014.
90. Jiao Y. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications / Y. Jiao, F. H. Stillinger, S. Torquato // *Physical Review E*. – 2008. – Vol. 77. – № 3. – P. 031135.
91. Kröner E. Bounds for effective elastic moduli of disordered materials / E. Kröner // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1977. – Vol. 25. – № 2. – P. 137-155.
92. Fokin A. G. Calculation of the elastic moduli of inhomogeneous materials / A. G. Fokin, T. D. Shermegor // *Polymer Mechanics*. – 1972. – Vol. 4. – № 4-6. –

P. 481-486.

93. Michel J. C. Effective properties of composite materials with periodic microstructure: A computational approach / J. C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 1999. – Vol. 172. – № 1-4. – P. 109-143.

94. Соколкин Ю. В. Сингулярное приближение метода периодических составляющих для дисперсий деформаций в фазах композита / Ю. В. Соколкин, А. А. Паньков // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2001. – Т. 7. – № 4. – С. 427-433.

95. Соколкин Ю. В. Механика деформирования и разрушения структурно-неоднородных тел / Ю. В. Соколкин, А. А. Ташкинов. – Москва : Наука, 1984. – 116 с.

96. Соколкин Ю. В. Многоточечные моментные функции распределения деформаций и напряжений в стохастических композитах / Ю. В. Соколкин, Т. А. Волкова // Механика композитных материалов. – 1991. – № 4. – С. 662.

97. Соколкин Ю. В. Расчет распределения деформаций и напряжений в зернистых композитах с учетом реальных моментных функций свойств микроструктуры / Ю. В. Соколкин, Т. А. Волкова // Механика композиционных материалов и конструкций. – 1998. – Т. 4. – № 3. – С. 70-85.

98. Евлампиева С. Е. Новый метод оценки эффективных свойств среды с хаотично расположенными включениями / С. Е. Евлампиева, В. В. Мошев // Деформирование и разрушение структурно-неоднородных материалов и конструкций. – 1989. – С. 22-26.

99. Зайцев А. В. Новый метод построения моментных функций второго порядка случайной структуры полимербетонов / А. В. Зайцев, Я. К. Покатаев // Вестник ПГТУ. Математ. моделирование систем и процессов. – 2007. – № 15. – С. 28-45.

100. Паньков А. А. Статистическая механика пьезокомпозитов / А. А.

Паньков. – Пермь : Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2009. – 480 с.

101. Паньков А. А. Точные соотношения для дисперсий и корреляционных моментов деформаций в фазах двухфазных композитов / А. А. Паньков // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2001. – Т. 7. – № 1. – С. 82-89.

102. Аношкин А. Н. Поля микронапряжений и механические свойства разупорядоченных волокнистых композитов / А. Н. Аношкин, Ю. В. Соколкин, А. А. Ташкинов // Механика композитных материалов. – 1990. – № 5. – С. 860-865.

103. Ильиных А. В. Компьютерный синтез и статистический анализ распределения структурных характеристик зернистых композиционных материалов / А. В. Ильиных, М. В. Радионова, В. Э. Вильдеман // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2010. – Т. 16. – № 2. – С. 251-265.

104. Вильдеман В. Э. Механика неупругого деформирования и разрушения композиционных материалов / В. Э. Вильдеман, Ю. В. Соколкин, А. А. Ташкинов. – Москва : Наука, 1997. – 288 с.

105. Мошев В. В. Влияние структурных особенностей на эффективные механические свойства зернистых композитов. 1. Плоская деформация / В. В. Мошев, С. Е. Евлампиева // Механика композиционных материалов и конструкций. – 1996. – Т. 2. – № 1. – С. 6.

106. Turner D. M. Efficient computation of the angularly resolved chord length distributions and lineal path functions in large microstructure datasets / D. M. Turner, S. R. Niezgoda, S. R. Kalidindi // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2016. – Vol. 24. – № 7. – P. 075002.

107. Li M. Determination of non-spherical particle size distribution from chord length measurements. Part 1: Theoretical analysis / M. Li, D. Wilkinson // Chemical Engineering Science. – 2005. – Vol. 60. – № 12. – P. 3251-3265.

108. Beran M. J. Mean field variations in a statistical sample of heterogeneous linearly elastic solids / M. J. Beran, J. J. McCoy // *International Journal of Solids and Structures*. – 1970. – Vol. 6. – № 8. – P. 1035-1054.
109. Jeffrey D. J. Conduction Through a Random Suspension of Spheres / D. J. Jeffrey // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 1973. – Vol. 335. – № 1602. – P. 355-367.
110. Lu S. Effective conductivity of composites with spherical inclusions: Effect of coating and detachment / S. Lu, J. Song // *Journal of applied physics*. – 1996. – Vol. 79. – № January. – P. 609-618.
111. Torquato S. Effective stiffness tensor of composite media : II. Applications to isotropic dispersions / S. Torquato // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1998. – Vol. 46. – № 8. – P. 1411-1440.
112. Torquato S. Exact expression for the effective elastic tensor of disordered composites / S. Torquato // *Physical Review Letters*. – 1997. – Vol. 79. – № 4. – P. 681-684.
113. Tashkinov M. Method of successive approximations in stochastic elastic boundary value problem for structurally heterogeneous materials / M. Tashkinov, V. Wildemann, N. Mikhailova // *Computational Materials Science*. – 2012. – Vol. 52. – № 1. – P. 101-106.
114. Tashkinov M. Statistical characteristics of structural stochastic stress and strain fields in polydisperse heterogeneous solid media / M. Tashkinov // *Computational Materials Science*. – 2014. – Vol. 94. – № C. – P. 44-50.
115. Tashkinov M. Micro-scale modeling of phase-level elastic fields of SiC reinforced metal matrix multiphase composites using statistical approach / M. Tashkinov // *Computational Materials Science*. – 2016. – Vol. 116. – P. 113-121.
116. Tashkinov M. Multipoint Approximation of Statistical Descriptors of Local Strain and Stress Fields in Heterogeneous Media Using Integral Equation Method / M. Tashkinov // *Advances in Mathematical Physics*. – 2018. – Vol. 2018. – P. 1-9.

117. Tashkinov M. A. Optimization of Elastic Properties of Composite Laminates Using Fiber-Optic Strain Sensors / M. A. Tashkinov, V. P. Matveenko // *Applied Composite Materials*. – 2020. – Vol. 27. – № 5. – P. 491-509.
118. Tashkinov M. A. Modeling of the Effect of Microscale Morphological Parameters on the Deformation Behavior of Porous Materials with a Metal Matrix / M. A. Tashkinov, A. S. Shalimov // *Physical Mesomechanics*. – 2021. – Vol. 24. – № 5. – P. 618-624.
119. Tashkinov M. A. Multipoint stochastic approach to localization of microscale elastic behavior of random heterogeneous media / M. A. Tashkinov // *Computers & Structures*. – 2021. – Vol. 249. – P. 106474.
120. Kononov E. Reconstruction of 3D Random Media from 2D Images: Generative Adversarial Learning Approach / E. Kononov, M. Tashkinov, V. V. Silberschmidt // *Computer-Aided Design*. – 2023. – Vol. 158. – P. 103498.
121. Dolgikh D. Introducing microarchitecture into 3D-printed prosthesis socket: Pressure distribution and mechanical performance / D. Dolgikh, M. Tashkinov, D. Sudoplatova, V. V. Silberschmidt // *Medical Engineering and Physics*. – 2023. – Vol. 122. – № August. – P. 104075.
122. Lobov E. Effect of Short Carbon Fiber Reinforcement on Mechanical Properties of 3D-Printed Acrylonitrile Butadiene Styrene / E. Lobov, A. Dobryднеva, I. Vindokurov, M. Tashkinov // *Polymers*. – 2023. – Vol. 15. – № 9. – P. 2011.
123. Elenskaya N. Understanding of trabecular-cortical transition zone: Numerical and experimental assessment of multi-morphology scaffolds / N. Elenskaya, M. Tashkinov, I. Vindokurov [et al.] // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2023. – Vol. 147. – № August. – P. 106146.
124. Dolgikh D. A. Pressure redistribution in additively manufactured composite prosthesis by architecture control / D. A. Dolgikh, M. A. Tashkinov, V. V. Silberschmidt // *Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and*

Design. – 2024. – Vol. 7. – № 3. – P. 1565-1580.

125. Tashkinov M. Composites with Re-Entrant Lattice: Effect of Filler on Auxetic Behaviour / M. Tashkinov, A. Tarasova, I. Vindokurov [et al.] // Polymers. – 2023. – Vol. 15. – № 20. – P. 4076.

126. Pirogova Y. Elastic properties and compressive mechanical behaviour of closed-cell porous materials: Effect of microstructural morphology / Y. Pirogova, M. Tashkinov, I. Vindokurov, V. V. Silberschmidt // International Journal of Solids and Structures. – 2024. – Vol. 295. – P. 112791.

127. Lobov E. Mechanical Properties and Performance of 3D-Printed Acrylonitrile Butadiene Styrene Reinforced with Carbon, Glass and Basalt Short Fibers / E. Lobov, I. Vindokurov, M. Tashkinov // Polymers. – 2024. – Vol. 16. – № 8. – P. 1106.

128. Tashkinov M. Reconstruction of Random Structures Based on Generative Adversarial Networks: Statistical Variability of Mechanical and Morphological Properties / M. Tashkinov, Y. Pirogova, E. Kononov [et al.] // Mathematics. – 2024. – Vol. 13. – № 1. – P. 7.

129. Elenskaya N. Effect of degradation in polymer scaffolds on mechanical properties: Surface vs. bulk erosion / N. Elenskaya, P. Koryagina, M. Tashkinov, V. V. Silberschmidt // Computers in Biology and Medicine. – 2024. – Vol. 174. – № March. – P. 108402.

130. Elenskaya N. TPMS-based scaffolds: Adaptation of morphological properties and mechanical response to reference tissue / N. Elenskaya, M. Tashkinov, V. V. Silberschmidt // International Journal of Solids and Structures. – 2025. – Vol. 315. – № January. – P. 113366.

131. Dolgikh D. Enhancing the Strength of 3D-Printed Polymer Exoprosthetic Socket by Localized Non-Planar Continuous Carbon Fiber Reinforcement / D. Dolgikh, E. Lobov, I. Bezukladnikov [et al.] // Polymers. – 2025. – Vol. 17. – № 8. – P. 1097.

132. Kononov E. Efficient design of porous structures with superior mechanical properties using deep learning and multi-objective optimization / E. Kononov, M. Tashkinov // *Structural and Multidisciplinary Optimization*. – 2025. – Vol. 68. – № 7.
133. Pirogova Y. Design of lattice structures for trabecular-bone scaffolds: comparative analysis of morphology and compressive mechanical behaviour / Y. Pirogova, M. Tashkinov, I. Vindokurov [et al.] // *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*. – 2025.
134. Tashkinov M. A. Method of successive approximations in a stochastic boundary-value problem in the elasticity theory of structurally heterogeneous media / M. A. Tashkinov, V. E. Vildeman, N. V. Mikhailova // *Composites: Mechanics, Computations, Applications*. – 2011. – Vol. 2. – № 1. – P. 21-37.
135. Tashkinov M. A. M. A. Stochastic modelling of deformation process in elastoplastic composites with randomly located inclusions using high order correlation functions / M. A. M. A. Tashkinov // *PNRPU Mechanics Bulletin*. – 2014. – Vol. 2014. – № 3. – P. 163-185.
136. Tashkinov M. A. M. A. Modeling of elastic behavior of multicomponent composite materials based on approximate solution of stochastic boundary value problems / M. A. M. A. Tashkinov // *PNRPU Mechanics Bulletin*. – 2015. – Vol. 2015. – № 3. – P. 165-181.
137. Tashkinov M. A. Methods of Stochastic Mechanics for Characterization of Deformation in Randomly Reinforced Composite Materials / M. A. Tashkinov // *Engineering Materials* / eds. V. V Silberschmidt, V. P. Matveenko. – Cham : Springer, Cham, 2015. – Vol. 21. – P. 43-78.
138. Tashkinov M. A. Correlation functions of stress and strain fields in micro-heterogeneous media / M. A. Tashkinov, N. V. Mikhailova // *PNRPU Mechanics Bulletin*. – 2016. – № 4. – P. 35-51.
139. Tashkinov M. Characterization of microstructure of fibrous composites using

high-order correlation functions / M. Tashkinov // Solid State Phenomena. – 2016. – Vol. 243. – P. 121-129.

140. Tashkinov M. A. Stochastical model of microstructural failure based on restoration of distributions laws for random stress and strain fields in microheterogeneous media / M. A. Tashkinov // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2017. – № 4. – P. 76-91.

141. Tashkinov M. Statistical methods for mechanical characterization of randomly reinforced media / M. Tashkinov // Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes. – 2017. – Vol. 3. – № 1. – P. 18.

142. Tashkinov M. A. Optimization of mechanical characteristics of models of laminate composites using embedded optical fiber strain sensors / M. A. Tashkinov, V. P. Matveenko // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2018. – Vol. 2018. – № 4. – P. 136-144.

143. Tashkinov M. Method of calculation of elastic effective properties of two-phase polydisperse media using multipoint statistical descriptors and the integral equations technique / M. Tashkinov // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2019. – Vol. 2019. – № 2. – P. 203-214.

144. Elenskaya N. V. Numerical Modeling of the Deformation Behavior of Polymer Lattice Structures with a Density Gradient Based on Additive Technologies / N. V. Elenskaya, M. A. Tashkinov, V. V. Silberschmidt // Vestnik St. Petersburg University: Mathematics. – 2022. – Vol. 55. – № 4. – P. 443-452.

145. Ташкинов М. А. Многоточечные моментные функции структурных свойств полидисперсных композитов / М. А. Ташкинов // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки». – 2011. – Т. 2(23). – № 23. – С. 74-82.

146. Tashkinov M. High order multipoint approximations of stochastic elastic boundary value problem for polydisperse composites / M. Tashkinov, N. Mikhailova, V. Wildemann // ECCM 2012 - Composites at Venice, Proceedings of

the 15th European Conference on Composite Materials. – 2012.

147. Tashkinov M. Probabilistic description of stochastic processes of structural failure in advanced polydisperse composites / M. Tashkinov // 11th World Congress on Computational Mechanics, WCCM 2014, 5th European Conference on Computational Mechanics, ECCM 2014 and 6th European Conference on Computational Fluid Dynamics, ECFD 2014. – International Center for Numerical Methods in Engineering, 2014. – P. 237-244.

148. Tashkinov M. Characterisation of micro-scale mechanical behaviour of multiphase composites using stochastic boundary value problem solutions / M. Tashkinov, N. Mikhailova, V. Wildemann // ICCM International Conferences on Composite Materials. – 2015. – Vols. 2015-July. – № July. – P. 19-24.

149. Tashkinov M. Model of damage evolution in elements of sandwich panels with transversely isotropic properties using multi-criteria approach / M. Tashkinov, V. Wildemann, A. Anoshkin, A. Tashkinov // ECCM 2016 - Proceeding of the 17th European Conference on Composite Materials. – European Conference on Composite Materials, ECCM, 2016. – P. 26-30.

150. Mikhailova N. Correlation functions for strain fields in elastic-plastic composites with random microstructure / N. Mikhailova, M. Tashkinov // AIP Conference Proceedings. – American Institute of Physics Inc., 2016. – Vol. 1785. – P. 040039.

151. Tashkinov M. Method of assessment of mechanical characteristics of quasi-isotropic composite laminates using experimental data from fiber-optic strain sensors / M. Tashkinov, V. Matveenko // Procedia Structural Integrity. – 2017. – Vol. 5. – P. 577-583.

152. Tashkinov M. Estimation of microstructural failure probability based on restoration of the field distributions laws in components of heterogenous media / M. Tashkinov, E. Spaskova // Procedia Structural Integrity. – Elsevier B.V., 2017. – Vol. 5. – P. 608-613.

153. Tashkinov M. Multiscale Statistical Model of Progressive Failure in Random Heterogeneous Media / M. Tashkinov // Lecture Notes in Mechanical Engineering. – Pleiades Publishing, 2019. – Vol. Part F6. – P. 114-123.
154. Pirogova Y. Effect of voids shape on deformation of 3D-printed closed-cell porous structures / Y. Pirogova, M. Tashkinov // Procedia Structural Integrity. – 2021. – Vol. 37. – № C. – P. 1049-1056.
155. Ташкинов М. А. Программный продукт для создания конечно-элементных моделей представительных объемов композитов с короткими волокнами / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2025661295 от 05.05.2025. – 2025.
156. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для создания геометрических и конечно-элементных моделей неоднородных сред с упорядоченными включениями полиэдральной формы / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022682491 от 23.11.2022. – 2022.
157. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для создания геометрических и конечно-элементных моделей неоднородных структур с геометрией на основе диаграмм Вороного / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022683855 от 08.12.2022. – 2022.
158. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для создания двухфазных воксельных конечно-элементных моделей на основе произвольной трёхмерной геометрии / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022682374 от 22.11.2022. – 2022.
159. Еленская Н. В. Программа для оценки статистического распределения полей на основе данных конечно-элементных моделей / Н. В. Еленская, Е. А. Кононов, Ю. В. Пирогова, М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022684067 от 12.12.2022. – 2022.
160. Еленская Н. В. Программа для генерации конечно-элементных

функционально-градиентных структур на основе трижды периодических минимальных поверхностей / Н. В. Еленская, М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022684068 от 12.12.2022. – 2022.

161. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для создания представительных объемов неоднородных сред с включениями полиэдральной формы / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021682062 от 29.12.2021. – 2021.

162. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для тетраэдральной дискретизации закрытоячеистых неоднородных структур / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021682061 от 29.12.2021. – 2021.

163. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для создания тетраэдральных конечно-элементных моделей для представительных объемов трёхмерных взаимопроникающих структур / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020664276 от 11.11.2020. – 2020.

164. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для расчёта значений многоточечных статистических инструментов математической морфологии с использованием методов численного интегрирования / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020664275 от 11.11.2020. – 2020.

165. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для создания воксельных конечно-элементных моделей на основе морфологии представительных объемов / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020664121 от 09.11.2020. – 2020.

166. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для генерации статистически эквивалентных двумерных микроструктур на основе методов машинного

обучения / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2020664274 от 11.11.2020. – 2020.

167. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для расчёта вероятности разрушения компонент неоднородной среды на основе анализа распределения микроструктурных полей напряжений / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018661308 от 05.09.2018. – 2018.

168. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для анализа прогрессирующего разрушения представительных объемов неоднородной среды на основе данных о распределении значений критериев разрушения в компонентах / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018661309 от 05.09.2018. – 2018.

169. Ташкинов М. А. Модуль для вычисления эффективных свойств многокомпонентных материалов на основе анализа распределения полей напряжений и деформаций в представительных объемах / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2018610436 от 11.01.2018. – 2018.

170. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для расчёта центрального момента третьего порядка полей напряжений и деформаций в компонентах неоднородной среды / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017619872 от 08.09.2017. – 2017.

171. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для расчёта параметров законов распределения полей напряжений и деформаций в компонентах неоднородных сред / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017619531 от 25.08.2017. – 2017.

172. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для расчёта первого приближения условных и безусловных моментов полей напряжений и деформаций в многокомпонентных неоднородных средах в упругом случае /

М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016661133 от 30.09.2016. – 2016.

173. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для численного решения интегро-дифференциальных уравнений, содержащих функцию Грина / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016661176 от 03.10.2016. – 2016.

174. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для генерации и анализа трёхмерных многофазных представительных объемов композитов со сферическими включениями / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015661084 от 16.10.2015. – 2015.

175. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для построения и аппроксимации моментных функций представительных объемов двухфазных композитов / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015660369 от 29.09.2015. – 2015.

176. Ташкинов М. А. Вычислительный модуль для синтеза трёхмерных двухфазных представительных объемов композитов со сферическими и эллипсоидальными включениями / М. А. Ташкинов Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2015660370 от 29.09.2015. – 2015.

177. Binder K. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics : Graduate Texts in Physics. Vol. 0 / K. Binder, D. W. Heermann. – Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2010.

178. Torquato S. Modeling of physical properties of composite materials / S. Torquato // International Journal of Solids and Structures. – 2000. – Vol. 37. – № 1-2. – P. 411-422.

179. Fullwood D. T. Microstructure sensitive design for performance optimization / D. T. Fullwood, S. R. Niezgoda, B. L. Adams, S. R. Kalidindi // Progress in

Materials Science. – 2010. – Vol. 55. – № 6. – P. 477-562.

180. Moumen A. El. Effect of reinforcement shape on physical properties and representative volume element of particles-reinforced composites: Statistical and numerical approaches / A. El Moumen, T. Kanit, A. Imad, H. El Minor // Mechanics of Materials. – 2015. – Vol. 83. – P. 1-16.

181. Torquato S. Statistical Description of Microstructures / S. Torquato // Annual Review of Materials Research. – 2002. – Vol. 32. – № 1. – P. 77-111.

182. Matheron G. Random sets and integral geometry : Wiley series in probability and mathematical statistics: Probability and mathematical statistics / G. Matheron. – Wiley, 1975.

183. Mechanics of Random and Multiscale Microstructures. Mech. Random Multiscale Microstruct. / eds. D. Jeulin, M. Ostoj-Starzewski. – Vienna : Springer Vienna, 2001.

184. Serra J. Image Analysis and Mathematical Morphology / J. Serra. – 1982. – 270-291 p.

185. Najman L. Mathematical Morphology: From Theory to Applications / L. Najman, H. Talbot. – 2010. – 520 p.

186. Matheron G. The theory of regionalized variables and its applications. Vol. 5 / G. Matheron. – 1971.

187. Chiu S. N. Stochastic Geometry and Its Applications: Third Edition. Stoch. Geom. Its Appl. Third Ed. / S. N. Chiu, D. Stoyan, W. S. Kendall, J. Mecke. – 2013. – 1-555 p.

188. Yeong C. Reconstructing random media / C. Yeong, S. Torquato // Physical Review E. – 1998. – Vol. 57. – № 1. – P. 495-506.

189. Berryman J. G. Measurement of spatial correlation functions using image processing techniques / J. G. Berryman // Journal of Applied Physics. – 1985. – Vol. 57. – № 7. – P. 2374-2384.

190. Cule D. Generating random media from limited microstructural information via

stochastic optimization / D. Cule, S. Torquato // Journal of Applied Physics. – 1999. – Vol. 86. – № 6. – P. 3428-3437.

191. Li D. Representation of correlation statistics functions in heterogeneous materials using layered fast spherical harmonics expansion / D. Li, M. Khaleel, X. Sun, H. Garmestani // Computational Materials Science. – 2010. – Vol. 48. – № 1. – P. 133-139.

192. Debye P. Scattering by an inhomogeneous solid. II. the correlation function and its application / P. Debye, H. R. Anderson, H. Brumberger [et al.] // Journal of Applied Physics. – 1957. – Vol. 28. – № 6. – P. 679-683.

193. Corson P. B. Correlation functions for predicting properties of heterogeneous materials. II. Empirical construction of spatial correlation functions for two-phase solids / P. B. Corson // Journal of Applied Physics. – 1974. – Vol. 45. – № 7. – P. 3165-3170.

194. Walenta E. Small angle x-ray scattering / E. Walenta // Acta Polymerica. – 1985. – Vol. 36. – № 5. – P. 296-296.

195. Saheli G. Microstructure design of a two phase composite using two-point correlation functions / G. Saheli, H. Garmestani, B. L. Adams // Journal of Computer-Aided Materials Design. – 2005. – Vol. 11. – № 2-3. – P. 103-115.

196. Huang M. The n-point orientation correlation function and its application / M. Huang // International Journal of Solids and Structures. – 2005. – Vol. 42. – № 5-6. – P. 1425-1441.

197. Groeber M. A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. Part 1: Statistical characterization / M. Groeber, S. Ghosh, M. D. Uchic, D. M. Dimiduk // Acta Materialia. – 2008. – Vol. 56. – № 6. – P. 1257-1273.

198. Tewari A. Quantitative characterization of spatial clustering in three-dimensional microstructures using two-point correlation functions / A. Tewari, A. M. Gokhale, J. E. Spowart, D. B. Miracle // Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52. –

№ 2. – P. 307-319.

199. Hansen B. L. On the reconstruction of polycrystalline microstructures from two-point correlation statistics / B. L. Hansen, B. L. Adam, M. E. Lyon, A. J. Henrie // *Journal of Computer-Aided Materials Design*. – 2003. – Vol. 10. – № 3. – P. 163-173.

200. Roberts A. P. Statistical reconstruction of three-dimensional porous media from two-dimensional images / A. P. Roberts. – 1999. – Vol. 56. – № September. – P. 3203-3212.

201. Roberts A. P. Transport properties of heterogeneous materials derived from Gaussian random fields: Bounds and simulation / A. P. Roberts, M. Teubner // *Physical Review E*. – 1995. – Vol. 51. – № 5. – P. 4141-4154.

202. Kumar N. C. Reconstruction of periodic unit cells of multimodal random particulate composites using genetic algorithms / N. C. Kumar, K. Matouš, P. H. Geubelle // *Computational Materials Science*. – 2008. – Vol. 42. – № 2. – P. 352-367.

203. Basanta D. *Evolving Cellular Automata to Grow Microstructures* / D. Basanta, P. J. Bentley, M. A. Miodownik, E. A. Holm. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2003. – P. 1-10.

204. Fullwood D. T. Microstructure reconstructions from 2-point statistics using phase-recovery algorithms / D. T. Fullwood, S. R. Niezgoda, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2008. – Vol. 56. – № 5. – P. 942-948.

205. Jeulin D. Random texture models for material structures / D. Jeulin // *Statistics and Computing*. – 2000. – Vol. 10. – № 2. – P. 121-132.

206. Bochenek B. Reconstruction of random microstructures - A stochastic optimization problem / B. Bochenek, R. Pyrz // *Computational Materials Science*. – 2004. – Vol. 31. – № 1-2. – P. 93-112.

207. Al-Ostaz A. Statistical model for characterizing random microstructure of inclusion-matrix composites / A. Al-Ostaz, A. Diwakar, K. I. Alzebdeh // *Journal of*

Materials Science. – 2007. – Vol. 42. – № 16. – P. 7016-7030.

208. Baniassadi M. New approximate solution for N-point correlation functions for heterogeneous materials / M. Baniassadi, S. Ahzi, H. Garmestani [et al.] // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2012. – Vol. 60. – № 1. – P. 104-119.

209. Jiao Y. A superior descriptor of random textures and its predictive capacity / Y. Jiao, F. H. Stillinger, S. Torquato // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2009. – Vol. 106. – № 42. – P. 17634-17639.

210. Liu Y. Computational microstructure characterization and reconstruction for stochastic multiscale material design / Y. Liu, M. Steven Greene, W. Chen [et al.] // Computer-Aided Design. – 2013. – Vol. 45. – № 1. – P. 65-76.

211. Torquato S. Statistical Description of Microstructures / S. Torquato // Annual Review of Materials Research. – 2002. – Vol. 32. – № 1. – P. 77-111.

212. Quintanilla J. Microstructure functions for a model of statistically inhomogeneous random media / J. Quintanilla, S. Torquato // Physical Review E. – 1997. – Vol. 55. – № 2. – P. 1558-1565.

213. Hahn U. Stereological analysis and modelling of gradient structures / U. Hahn, A. Micheletti, R. Pohlink [et al.] // Journal of Microscopy. – 1999. – Vol. 195. – № 2. – P. 113-124.

214. Davis M. A. Statistically reconstructing continuous isotropic and anisotropic two-phase media while preserving macroscopic material properties / M. A. Davis, S. D. C. Walsh, M. O. Saar // Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics. – 2011. – Vol. 83. – № 2. – P. 1-11.

215. Sobczyk K. Stochastic Modeling of Microstructures : Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology / K. Sobczyk, D. J. Kirkner // Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. – 2001. – Vol. XX. – № 11. – P. 11-15.

216. Cox B. N. Stochastic Virtual Tests for High-Temperature Ceramic Matrix Composites / B. N. Cox, H. a. Bale, M. Begley [et al.] // Annual Review of Materials

- Research. – 2014. – Vol. 44. – № April. – P. 479-529.
217. Bostanabad R. Stochastic microstructure characterization and reconstruction via supervised learning / R. Bostanabad, A. T. Bui, W. Xie [et al.] // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 103. – P. 89-102.
218. Rozman M. G. Efficient reconstruction of multiphase morphologies from correlation functions / M. G. Rozman, M. Utz // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2001. – Vol. 63. – № 6. – P. 1-8.
219. Yeong C. L. Y. Reconstructing random media. II. Three-dimensional media from two-dimensional cuts / C. L. Y. Yeong, S. Torquato // *Physical Review E*. – 1998. – Vol. 58. – № 1. – P. 224-233.
220. Sheehan N. Generating microstructures with specified correlation functions / N. Sheehan, S. Torquato // *Journal of Applied Physics*. – 2001. – Vol. 89. – № 1. – P. 53-60.
221. Jiao Y. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles / Y. Jiao, F. H. Stillinger, S. Torquato // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2007. – Vol. 76. – № 3.
222. Jiao Y. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications / Y. Jiao, F. H. Stillinger, S. Torquato // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2008. – Vol. 77. – № 3. – P. 1-35.
223. Talukdar M. S. Stochastic Reconstruction of Particulate Media from Two-Dimensional Images / M. S. Talukdar, O. Torsaeter, M. A. Ioannidis // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 2002. – Vol. 248. – № 2. – P. 419-428.
224. Manwart C. Reconstruction of random media using Monte Carlo methods. / C. Manwart, R. Hilfer // *Physical review. E, Statistical physics, plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics*. – 1999. – Vol. 59. – № 5 Pt B. – P. 5596-9.
225. Torquato S. Necessary conditions on realizable two-point correlation functions of random media / S. Torquato // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. –

2006. – Vol. 45. – № 21. – P. 6923-6928.

226. Garmestani H. Semi-inverse Monte Carlo reconstruction of two-phase heterogeneous material using two-point functions / H. Garmestani, M. Baniassadi, D. S. Li [et al.] // International Journal of Theoretical and Applied Multiscale Mechanics. – 2009. – Vol. 1. – № 2. – P. 134.

227. Li D. S. 3D Reconstruction of Carbon Nanotube Composite Microstructure Using Correlation Functions / D. S. Li, M. Baniassadi, H. Garmestani [et al.] // Journal of Computational and Theoretical Nanoscience. – 2010. – Vol. 7. – № 8. – P. 1462-1468.

228. Baniassadi M. Three-phase solid oxide fuel cell anode microstructure realization using two-point correlation functions / M. Baniassadi, H. Garmestani, D. S. Li [et al.] // Acta Materialia. – 2011. – Vol. 59. – № 1. – P. 30-43.

229. Deng H. Utilizing real and statistically reconstructed microstructures for the viscoelastic modeling of polymer nanocomposites / H. Deng, Y. Liu, D. Gai [et al.] // Composites Science and Technology. – 2012. – Vol. 72. – № 14. – P. 1725-1732.

230. Sheidaei A. 3-D microstructure reconstruction of polymer nano-composite using FIB-SEM and statistical correlation function / A. Sheidaei, M. Baniassadi, M. Banu [et al.] // Composites Science and Technology. – 2013. – Vol. 80. – P. 47-54.

231. Baniassadi M. New approximate solution for N-point correlation functions for heterogeneous materials / M. Baniassadi, S. Ahzi, H. Garmestani [et al.] // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2012. – Vol. 60. – № 1. – P. 104-119.

232. Bailakanavar M. Automated modeling of random inclusion composites / M. Bailakanavar, Y. Liu, J. Fish, Y. Zheng // Engineering with Computers. – 2012. – Vol. 30. – № 4. – P. 609-625.

233. Bennett C. H. Serially deposited amorphous aggregates of hard spheres / C. H. Bennett // Journal of Applied Physics. – 1972. – Vol. 43. – № 6. – P. 2727-2734.

234. Lu G. Q. A New Algorithm for Simulating the Random Packing of Monosized Powder in CIP Processes / G. Q. Lu, L. B. Ti, K. Ishizaki // Materials and

Manufacturing Processes. – 1994. – Vol. 9. – № 4.

235. Kansal A. R. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order / A. R. Kansal, T. M. Truskett, S. Torquato // *Journal of Chemical Physics*. – 2000. – Vol. 113. – № 12. – P. 4844-4851.

236. Yang R. Y. Computer simulation of the packing of fine particles / R. Y. Yang, R. P. Zou, A. B. Yu // *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*. – 2000. – Vol. 62. – № 3 B. – P. 3900-3908.

237. Furukawa K. Simulated effect of box size and wall on porosity of random packings of spherical particles / K. Furukawa, K. Imai, M. Kurashige // *Acta Mechanica*. – 2000. – Vol. 140. – № 3-4. – P. 219-231.

238. He D. Computer simulation of random packing of unequal particles / D. He, N. Ekere, L. Cai // *Physical Review E*. – 1999. – Vol. 60. – № 6. – P. 7098-7104.

239. Nolan G. T. Computer simulation of random packing of hard spheres / G. T. Nolan, P. E. Kavanagh // *Powder Technology*. – 1992. – Vol. 72. – № 2. – P. 149-155.

240. Hinrichsen E. L. Geometry of random sequential adsorption / E. L. Hinrichsen, J. Feder, T. Jøssang // *Journal of Statistical Physics*. – 1986. – Vol. 44. – № 5-6. – P. 793-827.

241. Segurado J. A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites / J. Segurado, J. Llorca // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2002. – Vol. 50. – № 10. – P. 2107-2121.

242. Ghossein E. A fully automated numerical tool for a comprehensive validation of homogenization models and its application to spherical particles reinforced composites / E. Ghossein, M. Levesque // *International Journal of Solids and Structures*. – 2012. – Vol. 49. – № 11-12. – P. 1387-1398.

243. Sherwood J. D. Packing of spheroids in three-dimensional space by random sequential addition / J. D. Sherwood // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. – 1999. – Vol. 30. – № 24. – P. L839-L843.

244. Böhm H. J. Multi-inclusion unit cell models for metal matrix composites with randomly oriented discontinuous reinforcements / H. J. Böhm, A. Eckschlager, W. Han // *Computational Materials Science*. – 2002. – Vol. 25. – № 1-2. – P. 42-53.
245. Redenbach C. Statistical analysis and stochastic modelling of fibre composites / C. Redenbach, I. Vecchio // *Composites Science and Technology*. – 2011. – Vol. 71. – № 2. – P. 107-112.
246. Iorga L. Numerical characterization of material elastic properties for random fiber composites / L. Iorga, Y. Pan, A. Pelegri // *Journal of Mechanics of Materials and Structures*. – 2008. – Vol. 3. – № 7. – P. 1279-1298.
247. Williams S. R. Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction / S. R. Williams, A. P. Philipse // *Physical Review E*. – 2003. – Vol. 67. – № 5. – P. 051301.
248. Zhao J. Dense random packings of spherocylinders / J. Zhao, S. Li, R. Zou, A. Yu // *Soft Matter*. – 2012. – Vol. 8. – № 4. – P. 1003-1009.
249. Parkhouse J. G. The Random Packing of Fibres in Three Dimensions / J. G. Parkhouse, A. Kelly // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 1995. – Vol. 451. – № 1943. – P. 737-746.
250. Evans K. E. The packing of thick fibres / K. E. Evans, M. D. Ferrar // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 1989. – Vol. 22. – № 2. – P. 354-360.
251. Bezrukov A. Simulation and statistical analysis of random packings of ellipsoids / A. Bezrukov, D. Stoyan // *Particle and Particle Systems Characterization*. – 2007. – Vol. 23. – № 5. – P. 388-398.
252. Man W. Experiments on random packings of ellipsoids / W. Man, A. Donev, F. H. Stillinger [et al.] // *Physical Review Letters*. – 2005. – Vol. 94. – № 19.
253. Toll S. Packing mechanics of fiber reinforcements / S. Toll // *Polymer Engineering & Science*. – 1998. – Vol. 38. – № 8. – P. 1337-1350.
254. Evans K. E. Prediction of the maximum packing fraction achievable in

randomly oriented short-fibre composites / K. E. Evans, A. G. Gibson // *Composites Science and Technology*. – 1986. – Vol. 25. – № 2. – P. 149-162.

255. Pan Y. Numerical generation of a random chopped fiber composite RVE and its elastic properties / Y. Pan, L. Iorga, A. A. Pelegri // *Composites Science and Technology*. – 2008. – Vol. 68. – № 13. – P. 2792-2798.

256. Islam M. Microstructure modeling of random composites with cylindrical inclusions having high volume fraction and broad aspect ratio distribution / M. Islam, G. J. Tudryn, C. R. Picu // *Computational Materials Science*. – 2016. – Vol. 125. – P. 309-318.

257. Santosa S. On the modeling of crush behavior of a closed-cell aluminum foam structure / S. Santosa, T. Wierzbicki // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1998. – Vol. 46. – № 4. – P. 645-669.

258. Grenestedt J. L. Influence of wavy imperfections in cell walls on elastic stiffness of cellular solids / J. L. Grenestedt // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1998. – Vol. 46. – № 1. – P. 29-50.

259. Daxner T. Micromechanical models of metallic sponges with hollow struts / T. Daxner, R. D. Bitsche, H. J. Bohm // *Materials Science Forum*. – 2007. – Vols. 539-543. – P. 1857-1862.

260. Sihn S. Modeling and prediction of bulk properties of open-cell carbon foam / S. Sihn, A. K. Roy // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2004. – Vol. 52. – № 1. – P. 167-191.

261. Zhang X. X. Homogenization of the average thermo-elastoplastic properties of particle reinforced metal matrix composites: The minimum representative volume element size / X. X. Zhang, B. L. Xiao, H. Andrä, Z. Y. Ma // *Composite Structures*. – 2014. – Vol. 113. – № 1. – P. 459-468.

262. Su Y. Composite structure modeling and mechanical behavior of particle reinforced metal matrix composites / Y. Su, Q. Ouyang, W. Zhang [et al.] // *Materials Science and Engineering A*. – 2014. – Vol. 597. – P. 359-369.

263. Böhm H. J. Effects of particle shape on the thermoelastoplastic behavior of particle reinforced composites / H. J. Böhm, A. Rasool // International Journal of Solids and Structures. – 2016. – Vol. 87. – P. 90-101.
264. Böhm H. J. A Short Introduction to Continuum Micromechanics / H. J. Böhm // Mechanics of Microstructured Materials. – 2004. – P. 1-40.
265. Redenbach C. Microstructure models for cellular materials / C. Redenbach // Computational Materials Science. – 2009. – Vol. 44. – № 4. – P. 1397-1407.
266. Lazar E. A. Complete topology of cells, grains, and bubbles in three-dimensional microstructures / E. A. Lazar, J. K. Mason, R. D. MacPherson, D. J. Srolovitz // Physical Review Letters. – 2012. – Vol. 109. – № 9. – P. 10-14.
267. Gross D. Constructing microstructures of poly- and nanocrystalline materials for numerical modeling and simulation / D. Gross, M. Li // Applied Physics Letters. – 2002. – Vol. 80. – № 5. – P. 746-748.
268. Buryachenko V. A. The Multiscale Analysis of Multiple Interacting Inclusions Problem: Finite Number of Interacting Inclusions / V. A. Buryachenko, N. J. Pagano // Mathematics and Mechanics of Solids. – 2005. – Vol. 10. – № 1. – P. 25-62.
269. Oger L. Computer Simulations and Tessellations of Granular Materials / L. Oger, J. P. Troadec, A. Gervois, N. N. Medvedev // Foams and Emulsions. – Dordrecht : Springer Netherlands, 1999. – P. 527-546.
270. Knott G. M. Random Packing of Heterogeneous Propellants / G. M. Knott, T. L. Jackson, J. Buckmaster // AIAA Journal. – 2001. – Vol. 39. – № 4. – P. 678-686.
271. He D. Structure simulation of concentrated suspensions of hard spherical particles / D. He, N. N. Ekere // AIChE Journal. – 2001. – Vol. 47. – № 1. – P. 53-59.
272. Clarke A. S. Numerical simulation of the dense random packing of a binary mixture of hard spheres: Amorphous metals / A. S. Clarke, J. D. Wiley // Physical Review B. – 1987. – Vol. 35. – № 14. – P. 7350-7356.

273. Berryman J. G. Random close packing of hard spheres and disks / J. G. Berryman // *Physical Review A*. – 1983. – Vol. 27. – № 2. – P. 1053-1061.
274. Cheng Y. F. Dynamic simulation of random packing of spherical particles / Y. F. Cheng, S. J. Guo, H. Y. Lai // *Powder Technology*. – 2000. – Vol. 107. – № 1-2. – P. 123-130.
275. Lotwick H. W. Simulation of some spatial hard core models, and the complete packing problem / H. W. Lotwick // *Journal of Statistical Computation and Simulation*. – 1982. – Vol. 15. – № 4. – P. 295-314.
276. Lubachevsky B. D. Geometric properties of random disk packings / B. D. Lubachevsky, F. H. Stillinger // *Journal of Statistical Physics*. – 1990. – Vol. 60. – № 5-6. – P. 561-583.
277. Lubachevsky B. D. Disks vs. spheres: Contrasting properties of random packings / B. D. Lubachevsky, F. H. Stillinger, E. N. Pinson // *Journal of Statistical Physics*. – 1991. – Vol. 64. – № 3-4. – P. 501-524.
278. Ghossein E. Random generation of periodic hard ellipsoids based on molecular dynamics: A computationally-efficient algorithm / E. Ghossein, M. Lévesque // *Journal of Computational Physics*. – 2013. – Vol. 253. – P. 471-490.
279. Donev A. Neighbor List Collision-Driven Molecular Dynamics Simulation for Nonspherical Particles. I. Algorithmic Details II. Applications to Ellipses and Ellipsoids / A. Donev, S. Torquato, F. H. Stillinger // *J. Comput. Phys.* – 2004. – Vol. 202. – № 2. – P. 45.
280. Tomar V. Analyses of tensile deformation of nanocrystalline α -Fe₂O₃+fcc-Al composites using molecular dynamics simulations / V. Tomar, M. Zhou // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2007. – Vol. 55. – № 5. – P. 1053-1085.
281. Fullwood D. T. Generalized Pareto front methods applied to second-order material property closures / D. T. Fullwood, B. L. Adams, S. R. Kalidindi // *Computational Materials Science*. – 2007. – Vol. 38. – № 4. – P. 788-799.
282. Adams B. L. Finite approximations to the second-order properties closure in

single phase polycrystals / B. L. Adams, X. Gao, S. R. Kalidindi // *Acta Materialia*. – 2005. – Vol. 53. – № 13. – P. 3563-3577.

283. Shermergor T. D. *The Theory of Elasticity of Microinhomogeneous Media* / T. D. Shermergor. – Moscow : Nauka, 1977.

284. Hashin Z. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials / Z. Hashin, S. Shtrikman // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1963. – Vol. 11. – № 2. – P. 127-140.

285. Milton G. W. *The Theory of Composites*. Vol. 6 / G. W. Milton. – Cambridge University Press, 2002. – 719 p.

286. Ponte Castañeda P. *Nonlinear Composites and Microstructure Evolution* / P. Ponte Castañeda, P. Suquet // *Mechanics for a New Millennium*. – Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 2001. – P. 253-274.

287. Willis J. R. R. *Variational and Related Methods for the Overall Properties of Composites*. Vol. 21 / J. R. R. Willis. – 1981.

288. Milton G. W. Bounds on the elastic and transport properties of two-component composites / G. W. Milton // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1982. – Vol. 30. – № 3. – P. 177-191.

289. Torquato S. *Microscopic approach to transport in two-phase random media* / S. Torquato // Ph.D. Thesis State Univ. of New York, Stony Brook. – 1980.

290. Castaneda P. Three-point bounds and other estimates for strongly nonlinear composites / P. Castaneda // *Physical Review B*. – 1998. – Vol. 57. – № 19. – P. 12077-12083.

291. Ponte Castañeda P. Bounds for nonlinear composites via iterated homogenization / P. Ponte Castañeda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2012. – Vol. 60. – № 9. – P. 1583-1604.

292. Mikdam A. Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory / A. Mikdam, A. Makradi, S. Ahzi [et al.] // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2009. – Vol. 57. – № 1. –

P. 76-86.

293. Mikdam A. Statistical continuum theory for the effective conductivity of fiber filled polymer composites: Effect of orientation distribution and aspect ratio / A. Mikdam, A. Makradi, S. Ahzi [et al.] // *Composites Science and Technology*. – 2010. – Vol. 70. – № 3. – P. 510-517.

294. Baniassadi M. Statistical continuum theory for the effective conductivity of carbon nanotubes filled polymer composites / M. Baniassadi, A. Laachachi, A. Makradi [et al.] // *Thermochimica Acta*. – 2011. – Vol. 520. – № 1-2. – P. 33-37.

295. Buryachenko V. A. *Micromechanics of Heterogeneous Materials*. *Micromechanics Heterog. Mater.* / V. A. Buryachenko. – Boston, MA : Springer US, 2007. – 1-686 p.

296. Castañeda P. P. Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating yield II—applications / P. P. Castañeda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2002. – Vol. 50. – P. 759-782.

297. Ponte Castañeda P. Stationary variational estimates for the effective response and field fluctuations in nonlinear composites / P. Ponte Castañeda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2016. – Vol. 96. – P. 660-682.

298. Ponte Castañeda P. Bounds for nonlinear composites via iterated homogenization / P. Ponte Castañeda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2012. – Vol. 60. – № 9. – P. 1583-1604.

299. Ponte Castaneda P. Stationary variational estimates for the effective response and field fluctuations in nonlinear composites / P. Ponte Castaneda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2016. – Vol. 96. – P. 660-682.

300. Hashin Z. A Variational Approach to the Theory of the Effective Magnetic Permeability of Multiphase Materials / Z. Hashin, S. Shtrikman // *J. Appl. Phys.* – 1962. – Vol. 33. – № 10. – P. 3125-3131.

301. Benveniste Y. New exact results for the effective electric, elastic, piezoelectric and other properties of composite ellipsoid assemblages / Y. Benveniste, G. W.

Milton // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2003. – Vol. 51. – № 10. – P. 1773-1813.

302. Dykhne A. M. Conductivity of a two-dimensional two-phase system / A. M. Dykhne // Eksp. Teor. Fiz. – 1970. – Vol. 32. – № 59. – P. 110-115.

303. Keller J. B. Conductivity of a medium containing a dense array of perfectly conducting spheres or cylinders or nonconducting cylinders / J. B. Keller // Journal of Applied Physics. – 1963. – Vol. 34. – № 4. – P. 991-993.

304. McKenzie D. R. The Conductivity of Lattices of Spheres. II. The Body Centred and Face Centred Cubic Lattices / D. R. McKenzie, R. C. McPhedran, G. H. Derrick // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1978. – Vol. 362. – № 1709. – P. 211-232.

305. McPhedran R. C. The Conductivity of Lattices of Spheres. I. The Simple Cubic Lattice / R. C. McPhedran, D. R. McKenzie // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1978. – Vol. 359. – № 1696. – P. 45-63.

306. Guseva O. Matching thermal expansion of mica–polymer nanocomposites and metals / O. Guseva, H. R. Lusti, A. a Gusev // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2004. – Vol. 12. – № 3. – P. 101-105.

307. Kushch V. I. Conductivity of a periodic particle composite with transversely isotropic phases / V. I. Kushch // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1997. – Vol. 453. – № 1956. – P. 65-76.

308. Sahimi M. Non-linear and non-local transport processes in heterogeneous media: from long-range correlated percolation to fracture and materials breakdown / M. Sahimi // Physics Reports. – 1998. – Vol. 306. – № 4-6. – P. 213-395.

309. Rasool A. Effects of particle shape on the macroscopic and microscopic linear behaviors of particle reinforced composites / A. Rasool, H. J. Böhm // International Journal of Engineering Science. – 2012. – Vol. 58. – P. 21-34.

310. Chen Y. Diffusion on grain boundary networks: Percolation theory and

effective medium approximations / Y. Chen, C. A. Schuh // *Acta Materialia*. – 2006. – Vol. 54. – № 18. – P. 4709-4720.

311. Jayatilaka A. D. S. Statistical approach to brittle fracture / A. D. S. Jayatilaka, K. Trustrum // *Journal of Materials Science*. – 1977. – Vol. 12. – № 7. – P. 1426-1430.

312. Frary M. Grain boundary networks: Scaling laws, preferred cluster structure, and their implications for grain boundary engineering / M. Frary, C. A. Schuh // *Acta Materialia*. – 2005. – Vol. 53. – № 16. – P. 4323-4335.

313. Kanouté P. Multiscale methods for composites: A review / P. Kanouté, D. P. Boso, J. L. Chaboche, B. A. Schrefler // *Archives of Computational Methods in Engineering*. – 2009. – Vol. 16. – № 1. – P. 31-75.

314. Jiao Y. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications / Y. Jiao, F. H. Stillinger, S. Torquato // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2008. – Vol. 77. – № 3.

315. Jiao Y. Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles / Y. Jiao, F. H. H. Stillinger, S. Torquato // *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*. – 2007. – Vol. 76. – № 3. – P. 1-15.

316. Malmir H. Higher-order correlation functions in disordered media: Computational algorithms and application to two-phase heterogeneous materials / H. Malmir, M. Sahimi, Y. Jiao // *Physical Review E*. – 2018. – Vol. 98. – № 6. – P. 1-15.

317. Beran M. Statistical Continuum Theories / M. Beran // *Transactions of the Society of Rheology*. – 1965. – Vol. 9. – № 1. – P. 339-355.

318. Evans A. G. Microfracture from thermal expansion anisotropy: I. Single phase systems / A. G. Evans // *Acta Metallurgica*. – 1978. – Vol. 26. – № 12. – P. 1845-1853.

319. Fu Y. Some effects of microcracks on the mechanical properties of brittle

- solids-I. Stress, strain relations / Y. Fu, A. G. Evans // *Acta Metallurgica*. – 1985. – Vol. 33. – № 8. – P. 1515-1523.
320. Buryachenko V. A. Internal residual stresses in heterogeneous solids-A statistical theory for particulate composites / V. A. Buryachenko, W. S. Kreher // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1995. – Vol. 43. – № 7. – P. 1105-1125.
321. Buryachenko V. A. Thermoelastic stress fluctuations in random-structure coated particulate composites / V. A. Buryachenko, F. G. Rammerstorfer // *European Journal of Mechanics - A/Solids*. – 1998. – Vol. 17. – № 5. – P. 763-788.
322. Bergman D. J. The dielectric constant of a composite material-A problem in classical physics. Vol. 43 / D. J. Bergman. – 1978.
323. Bobeth M. Field fluctuations in multicomponent mixtures / M. Bobeth, G. Diener // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1986. – Vol. 34. – № 1. – P. 1-17.
324. Kreher W. Residual stresses and stored elastic energy of composites and polycrystals / W. Kreher // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1990. – Vol. 38. – № 1. – P. 115-128.
325. Xu X. F. A Green-function-based multiscale method for uncertainty quantification of finite body random heterogeneous materials / X. F. Xu, X. Chen, L. Shen // *Computers and Structures*. – 2009. – Vol. 87. – № 21-22. – P. 1416-1426.
326. Hori M. Analysis of probabilistic distribution and range of average stress in each phase of heterogeneous materials / M. Hori, J. Kubo // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1998. – Vol. 46. – № 3. – P. 537-556.
327. Babuška I. Damage analysis of fiber composites Part I: Statistical analysis on fiber scale / I. Babuška, B. Andersson, P. J. Smith, K. Levin // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. – 1999. – Vol. 172. – № 1-4. – P. 27-77.
328. Lomakin V. A. Statistical Problems of the Mechanics of Solid Deformable Bodies / V. A. Lomakin. – Moscow : Nauka, 1970.

329. Shvidler M. I. Statistical Hydrodynamics of Porous Media / M. I. Shvidler. – Moscow : Nauka, 1985.
330. Khoroshun L. P. Statistical Mechanics and Effective Properties of Materials / L. P. Khoroshun, B. P. Maslov, E. N. Shikula, L. V. Nazarenko. – Kiev : Naukova Dumka, 1993.
331. Хорошун Л. П. Методы случайных функций в задачах о макроскопических свойствах микронеоднородных сред / Л. П. Хорошун // Прикл. механика. – 1978. – Т. 14. – № 2. – С. 3-17.
332. Buryachenko V. A. Inhomogeneity of the first and second statistical moments of stresses inside the heterogeneities of random structure matrix composites / V. A. Buryachenko // International Journal of Solids and Structures. – 2011. – Vol. 48. – № 11-12. – P. 1665-1687.
333. Sakata S. A Microscopic failure probability analysis of a unidirectional fiber reinforced composite material via a multiscale stochastic stress analysis for a microscopic random variation of an elastic property / S. Sakata, F. Ashida, K. Enya // Computational Materials Science. – 2012. – Vol. 62. – P. 35-46.
334. Mishnaevsky L. Effect of microstructure of particle reinforced composites on the damage evolution: Probabilistic and numerical analysis / L. Mishnaevsky, K. Derrien, D. Baptiste // Composites Science and Technology. – 2004. – Vol. 64. – № 12. – P. 1805-1818.
335. Greenberg M. D. Applications of Green's Functions in Science and Engineering / M. D. Greenberg, J. W. Miles // Physics Today. – 1973. – Vol. 26. – № 1. – P. 76-77.
336. Kröner E. Elastic moduli of perfectly disordered composite materials / E. Kröner // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 1967. – Vol. 15. – № 5. – P. 319-329.
337. Kachanov M. Handbook of Elasticity Solutions. Handb. Elast. Solut. / M. Kachanov, B. Shafiro, I. Tsukrov. – Dordrecht : Springer Netherlands, 2003.

338. Schwarz J. H. The generalized Stieltjes transform and its inverse / J. H. Schwarz // *Journal of Mathematical Physics*. – 2005. – Vol. 46. – № 1. – P. 013501.
339. Niezgoda S. R. Novel microstructure quantification framework for databasing, visualization, and analysis of microstructure data / S. R. Niezgoda, A. K. Kanjarla, S. R. Kalidindi // *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*. – 2013. – Vol. 2. – № 1. – P. 54-80.
340. Malcolm M. A. Local Versus Global Strategies for Adaptive Quadrature / M. A. Malcolm, R. B. Simpson // *ACM Transactions on Mathematical Software*. – 1975. – Vol. 1. – № 2. – P. 129-146.
341. Genz A. C. An Imbedded Family of Fully Symmetric Numerical Integration Rules / A. C. Genz, A. A. Malik // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. – 1983. – Vol. 20. – № 3. – P. 580-588.
342. Davis P. J. *Methods of numerical integration - Second edition* / P. J. Davis, P. Rabinowitz. – 1984.
343. Iri M. On a certain quadrature formula / M. Iri, S. Moriguti, Y. Takasawa // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. – 1987. – Vol. 17. – № 1-2. – P. 3-20.
344. Murota K. Parameter tuning and repeated application of the IMT-type transformation in numerical quadrature / K. Murota, M. Iri // *Numerische Mathematik*. – 1982. – Vol. 38. – № 3. – P. 347-363.
345. Cam L. Le. *Asymptotics in Statistics: Some Basic Concepts* / L. Le Cam, G. Lo Yang. – 2000. – 285 p.
346. Tashkinov M. A. *Methods of Stochastic Mechanics for Characterization of Deformation in Randomly Reinforced Composite Materials BT - Mechanics of Advanced Materials: Analysis of Properties and Performance* / M. A. Tashkinov // eds. V. V Silberschmidt, V. P. Matveenko. – Cham : Springer International Publishing, 2015. – P. 43-78.
347. Ekici R. Effects of random particle dispersion and size on the indentation

behavior of SiC particle reinforced metal matrix composites / R. Ekici, M. Kemal Apalak, M. Yildirim, F. Nair // *Materials and Design*. – 2010. – Vol. 31. – № 6. – P. 2818-2833.

348. Miranda G. Hybrid composites - Metallic and ceramic reinforcements influence on mechanical and wear behavior / G. Miranda, M. Buciumeanu, S. Madeira [et al.] // *Composites Part B: Engineering*. – 2015. – Vol. 74. – P. 153-165.

349. Кристенсен Р. Введение в механику композитов / Р. Кристенсен. – Москва : Мир, 1984. – 336 с.

350. Berberan-Santos M. N. Expressing a probability density function in terms of another PDF: A generalized gram-charlier expansion / M. N. Berberan-Santos // *Journal of Mathematical Chemistry*. – 2007. – Vol. 42. – № 3. – P. 585-594.

351. Berk N. F. Scattering properties of a model bicontinuous structure with a well defined length scale / N. F. Berk // *Physical Review Letters*. – 1987. – Vol. 58. – № 25. – P. 2718-2721.

352. Cahn J. W. Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems / J. W. Cahn // *The Journal of Chemical Physics*. – 1965. – Vol. 42. – № 1. – P. 93-99.

353. Pan B. Two-dimensional digital image correlation for in-plane displacement and strain measurement: a review / B. Pan, K. Qian, H. Xie, A. Asundi // *Measurement Science and Technology*. – 2009. – Vol. 20. – № 6. – P. 062001.

354. Staszewski W. J. Health monitoring of aerospace composite structures - Active and passive approach / W. J. Staszewski, S. Mahzan, R. Traynor // *Composites Science and Technology*. – 2009. – Vol. 69. – № 11-12. – P. 1678-1685.

355. Oliveira R. de. Optic fibre sensor for real-time damage detection in smart composite / R. de Oliveira, O. Frazão, J. . Santos, A. . Marques // *Computers & Structures*. – 2004. – Vol. 82. – № 17. – P. 1315-1321.

356. Diamanti K. Structural health monitoring techniques for aircraft composite structures / K. Diamanti, C. Soutis // *Progress in Aerospace Sciences*. – 2010. –

Vol. 46. – № 8. – P. 342-352.

357. Du W. Fundamentals and applications of optical fiber Bragg grating sensors to textile structural composites / W. Du, X. M. Tao, H. Y. Tam, C. L. Choy // Composite Structures. – 1998. – Vol. 42. – № 3. – P. 217-229.

358. Sante R. Di. Reliability and accuracy of embedded fiber Bragg grating sensors for strain monitoring in advanced composite structures / R. Di Sante, L. Donati, E. Troiani, P. Proli // Metals and Materials International. – 2014. – Vol. 20. – № 3. – P. 537-543.

359. Lau K.-T. Structural health monitoring for smart composites using embedded FBG sensor technology / K.-T. Lau // Materials Science and Technology. – 2014. – Vol. 30. – № 13. – P. 1642-1654.

360. Kuang K. S. C. Embedded fibre Bragg grating sensors in advanced composite materials / K. S. C. Kuang, R. Kenny, M. P. Whelan [et al.] // Composites Science and Technology. – 2001. – Vol. 61. – № 10. – P. 1379-1387.

361. Majumder M. Fibre Bragg gratings in structural health monitoring-Present status and applications / M. Majumder, T. K. Gangopadhyay, A. K. Chakraborty [et al.] // Sensors and Actuators, A: Physical. – 2008. – Vol. 147. – № 1. – P. 150-164.

362. Hafizi Z. M. Impact location determination on thin laminated composite plates using an NIR-FBG sensor system / Z. M. Hafizi, J. Epaarachchi, K. T. Lau // Measurement: Journal of the International Measurement Confederation. – 2015. – Vol. 61. – P. 51-57.

363. Tao X. M. Integration of Fibre-optic Sensors in Smart Textile Composites: Design and Fabrication / X. M. Tao // Journal of the Textile Institute. – 2000. – Vol. 91. – № 3. – P. 448-459.

364. Cai J. Structural health monitoring for composite materials / J. Cai, L. Qiu, S. Yuan [et al.] // Composites and their applications. – 2012. – P. 37-58.

365. Geng X. Sensing characteristics of FBG sensor embedded in CFRP laminate / X. Geng, M. Jiang, L. Gao [et al.] // Measurement: Journal of the International

Measurement Confederation. – 2017. – Vol. 98. – P. 199-204.

366. Fan Y. Characterization of a FBG strain gage array embedded in composite structure / Y. Fan, M. Kahrizi // *Sensors and Actuators, A: Physical*. – 2005. – Vol. 121. – № 2. – P. 297-305.

367. Kablov E. N. Application of optical fiber as strain gauges in polymer composite materials / E. N. Kablov, D. V. Sivakov, I. N. Gulyaev [et al.] // *Polymer Science Series D*. – 2011. – Vol. 4. – № 3. – P. 246-251.

368. Alemohammad H. Opto-Mechanical Modeling of Fiber Bragg Grating Sensors / H. Alemohammad. – Elsevier Inc., 2018. – 1-26 p.

369. Matveenko V. P. Measurement of strains by optical fiber Bragg grating sensors embedded into polymer composite material / V. P. Matveenko, I. N. Shardakov, A. A. Voronkov [et al.] // *Structural Control and Health Monitoring*. – 2018. – Vol. 25. – № 3. – P. e2118.

370. Kinet D. Fiber Bragg grating sensors toward structural health monitoring in composite materials: challenges and solutions / D. Kinet, P. Mégret, K. W. Goossen [et al.] // *Sensors (Basel, Switzerland)*. – 2014. – Vol. 14. – № 4. – P. 7394-7419.

371. Nair A. K. Process monitoring of fibre reinforced composites using a multi-measurand fibre-optic sensor / A. K. Nair, V. R. Machavaram, R. S. Mahendran [et al.] // *Sensors and Actuators, B: Chemical*. – 2015. – Vol. 212. – P. 93-106.

372. Luyckx G. Strain Measurements of Composite Laminates with Embedded Fibre Bragg Gratings: Criticism and Opportunities for Research / G. Luyckx, E. Voet, N. Lammens, J. Degrieck // *Sensors*. – 2010. – Vol. 11. – № 1. – P. 384-408.

373. Li X. Embedded Fiber Bragg Grating Sensors in Polymer Structures Fabricated by Layered Manufacturing / X. Li, F. Prinz // *Journal of Manufacturing Processes*. – 2003. – Vol. 5. – № 1. – P. 78-86.

374. Tserpes K. I. Strain and damage monitoring in CFRP fuselage panels using fiber Bragg grating sensors. Part I: Design, manufacturing and impact testing / K. I. Tserpes, V. Karachalios, I. Giannopoulos [et al.] // *Composite Structures*. – 2014. –

Vol. 107. – P. 726-736.

375. Baere I. De. Strain monitoring in thermoplastic composites with optical fiber sensors: Embedding process, visualization with micro-tomography, and fatigue results / I. De Baere, E. Voet, W. Van Paepegem [et al.] // Journal of Thermoplastic Composite Materials. – 2007. – Vol. 20. – № 5. – P. 453-472.

376. Yashiro S. A new approach to predicting multiple damage states in composite laminates with embedded FBG sensors / S. Yashiro, N. Takeda, T. Okabe, H. Sekine // Composites Science and Technology. – 2005. – Vol. 65. – № 3-4. – P. 659-667.

377. Beukema R. P. Embedding Technologies of FBG Sensors in Composites : Technologies , Applications and Practical Use / R. P. Beukema // 6th European Workshop on Structural Health Monitoring. – 2012. – P. 1-8.

378. Leduc D. Architecture of optical fiber sensor for the simultaneous measurement of axial and radial strains / D. Leduc, Y. Lecieux, P. A. Morvan, C. Lupi // Smart Materials and Structures. – 2013. – Vol. 22. – № 7. – P. 075002.

379. Guyard R. Superposition of fiber Bragg and LPG gratings for embedded strain measurement / R. Guyard, D. Leduc, Y. Lecieux, C. Lupi // Comptes Rendus Physique. – 2016. – Vol. 17. – № 9. – P. 1027-1037.

380. Anoshkin A. N. Measurement of inhomogeneous strain fields by fiber optic sensors embedded in a polymer composite material / A. N. Anoshkin, A. A. Voronkov, N. A. Kosheleva [et al.] // Mechanics of Solids. – 2016. – Vol. 51. – № 5. – P. 542-549.

381. Levenberg K. A Method for the solution of certain non-linear problems in least squares. / K. Levenberg // Q. Appl. Math. – 1944. – Vol. 11. – № 2. – P. 164-168.

382. Marquardt D. An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters / D. Marquardt // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. – 1963. – Vol. 11. – № 2. – P. 431-441.

383. Chen Y. Porous ceramics: Light in weight but heavy in energy and environment technologies / Y. Chen, N. Wang, O. Ola [et al.] // Materials Science and

- Engineering R: Reports. – 2021. – Vol. 143. – № September 2020. – P. 100589.
384. Bans E. D. Structured Catalysts for Soot Combustion for Diesel Engines / E. D. Bans, M. A. Ulla, E. E. Mir, V. G. Milt // Diesel Engine - Combustion, Emissions and Condition Monitoring. – 2013. – № June.
385. Saadatfar M. Structure and deformation correlation of closed-cell aluminium foam subject to uniaxial compression / M. Saadatfar, M. Mukherjee, M. Madadi [et al.] // Acta Materialia. – 2012. – Vol. 60. – № 8. – P. 3604-3615.
386. Mu Y. Deformation mechanisms of closed-cell aluminum foam in compression / Y. Mu, G. Yao, L. Liang [et al.] // Scripta Materialia. – 2010. – Vol. 63. – № 6. – P. 629-632.
387. Ramamurty U. Variability in mechanical properties of a metal foam / U. Ramamurty, A. Paul // Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52. – № 4. – P. 869-876.
388. Tan P. J. Dynamic compressive strength properties of aluminium foams. Part i - Experimental data and observations / P. J. Tan, S. R. Reid, J. J. Harrigan [et al.] // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2005. – Vol. 53. – № 10. – P. 2174-2205.
389. Nguyen T. T. Experimental and numerical investigation of influence of air-voids on the compressive behaviour of foamed concrete / T. T. Nguyen, H. H. Bui, T. D. Ngo, G. D. Nguyen // Materials and Design. – 2017. – Vol. 130. – № May. – P. 103-119.
390. Gong X. FEM simulation on elastic parameters of porous silicon with different pore shapes / X. Gong, J. Bustillo, L. Blanc, G. Gautier // International Journal of Solids and Structures. – 2020. – Vol. 190. – P. 238-243.
391. Guo F.-L. Modeling and characterizations of mechanical behaviors of short carbon fiber and short glass fiber reinforced polyetherimide composites / F.-L. Guo, J.-M. Hu, T. Guan [et al.] // Composites Science and Technology. – 2022. – Vol. 229. – P. 109685.
392. Li X. High strength carbon-fiber reinforced polyamide 6 composites additively

manufactured by screw-based extrusion / X. Li, J. He, Z. Hu [et al.] // *Composites Science and Technology*. – 2022. – Vol. 229. – № May. – P. 109707.

393. Hessman P. A. On mean field homogenization schemes for short fiber reinforced composites: Unified formulation, application and benchmark / P. A. Hessman, F. Welschinger, K. Hornberger, T. Böhlke // *International Journal of Solids and Structures*. – 2021. – Vols. 230-231. – P. 111141.

394. Sang L. Development of short basalt fiber reinforced polylactide composites and their feasible evaluation for 3D printing applications / L. Sang, S. Han, Z. Li [et al.] // *Composites Part B: Engineering*. – 2019. – Vol. 164. – № October 2018. – P. 629-639.

395. Yazdanpanah Z. 3D Bioprinted Scaffolds for Bone Tissue Engineering: State-Of-The-Art and Emerging Technologies / Z. Yazdanpanah, J. D. Johnston, D. M. L. Cooper, X. Chen // *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*. – 2022. – Vol. 10. – № April.

396. Gupta K. Artificial bone scaffolds and bone joints by additive manufacturing: A review / K. Gupta, K. Meena // *Bioprinting*. – 2023. – P. e00268.

397. Gómez S. Design and properties of 3D scaffolds for bone tissue engineering / S. Gómez, M. D. Vlad, J. López, E. Fernández // *Acta Biomaterialia*. – 2016. – Vol. 42. – P. 341-350.

398. Arabnejad S. High-strength porous biomaterials for bone replacement: A strategy to assess the interplay between cell morphology, mechanical properties, bone ingrowth and manufacturing constraints / S. Arabnejad, R. Burnett Johnston, J. A. Pura [et al.] // *Acta Biomaterialia*. – 2016. – Vol. 30. – P. 345-356.

399. Bratsun D. Numerical Analysis of Permeability of Functionally Graded Scaffolds / D. Bratsun, N. Elenskaya, R. Siraev, M. Tashkinov // *Fluid Dynamics & Materials Processing*. – 2024. – Vol. 20. – № 7. – P. 1463-1479.

400. Gadgil V. Investigating wall shear stress and the static pressure in bone scaffolds: a study of porosity and fluid flow dynamics / V. Gadgil, S. Kumbhojkar,

T. Sapre [et al.] // *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*. – 2025. – Vol. 24. – № 1. – P. 185-195.

401. Truscetto S. Prediction of permeability of regular scaffolds for skeletal tissue engineering: A combined computational and experimental study / S. Truscetto, G. Kerckhofs, S. Van Bael [et al.] // *Acta Biomaterialia*. – 2012. – Vol. 8. – № 4. – P. 1648-1658.

402. Sreedhar N. 3D printed feed spacers based on triply periodic minimal surfaces for flux enhancement and biofouling mitigation in RO and UF / N. Sreedhar, N. Thomas, O. Al-Ketan [et al.] // *Desalination*. – 2018. – Vol. 425. – P. 12-21.

403. Du J. Characterising variability and regional correlations of microstructure and mechanical competence of human tibial trabecular bone: An in-vivo HR-pQCT study / J. Du, K. Brooke-Wavell, M. A. Paggiosi [et al.] // *Bone*. – 2019. – Vol. 121. – P. 139-148.

404. Du J. Remodelling of trabecular bone in human distal tibia: A model based on an in-vivo HR-pQCT study / J. Du, S. Li, V. V. Silberschmidt // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2021. – Vol. 119. – № March. – P. 104506.

405. Aboudi J. Micromechanical analysis of lattice blocks / J. Aboudi, R. Gilat // *International Journal of Solids and Structures*. – 2005. – Vol. 42. – № 15. – P. 4372-4392.

406. Ptochos E. Shear modulus determination of cuboid metallic open-lattice cellular structures by analytical, numerical and homogenisation methods / E. Ptochos, G. Labeas // *Strain*. – 2012. – Vol. 48. – № 5. – P. 415-429.

407. Zadpoor A. A. Mechanics of additively manufactured biomaterials / A. A. Zadpoor // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2017. – Vol. 70. – P. 1-6.

408. Xu Z. Functionally Graded Lattice Structures: Fabrication Methods, Mechanical Properties, Failure Mechanisms and Applications / Z. Xu, S. M. J.

- Razavi, M. R. Ayatollahi // *Comprehensive Structural Integrity (Second Edition)* / eds. M. H. F. Aliabadi, W. O. Soboyejo. – Oxford : Elsevier, 2022. – P. 433-466.
409. Ahmadi S. M. Mechanical behavior of regular open-cell porous biomaterials made of diamond lattice unit cells / S. M. Ahmadi, G. Campoli, S. Amin Yavari [et al.] // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2014. – Vol. 34. – P. 106-115.
410. Castro A. P. G. Numerical and experimental evaluation of TPMS Gyroid scaffolds for bone tissue engineering / A. P. G. Castro, R. B. Ruben, S. B. Gonçalves [et al.] // *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. – 2019. – Vol. 22. – № 6. – P. 567-573.
411. Al-Ketan O. Topology-mechanical property relationship of 3D printed strut, skeletal, and sheet based periodic metallic cellular materials / O. Al-Ketan, R. Rowshan, R. K. Abu Al-Rub // *Additive Manufacturing*. – 2018. – Vol. 19. – P. 167-183.
412. Bobbert F. S. L. Additively manufactured metallic porous biomaterials based on minimal surfaces: A unique combination of topological, mechanical, and mass transport properties / F. S. L. Bobbert, K. Lietaert, A. A. Eftekhari [et al.] // *Acta Biomaterialia*. – 2017. – Vol. 53. – P. 572-584.
413. Afshar M. Additive manufacturing and mechanical characterization of graded porosity scaffolds designed based on triply periodic minimal surface architectures / M. Afshar, A. P. Anaraki, H. Montazerian, J. Kadkhodapour // *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*. – 2016. – Vol. 62. – P. 481-494.
414. Soyarslan C. 3D stochastic bicontinuous microstructures: Generation, topology and elasticity / C. Soyarslan, S. Bargmann, M. Pradas, J. Weissmüller // *Acta Materialia*. – 2018. – Vol. 149. – P. 326-340.
415. Bargmann S. Materials based design of structures: Computational modeling of the mechanical behavior of gold-polymer nanocomposites / S. Bargmann, C. Soyarslan, E. Husser, N. Konchakova // *Mechanics of Materials*. – 2016. – Vol. 94.

– P. 53-65.

416. Liang H. Trabecular-like Ti-6Al-4V scaffolds for orthopedic: fabrication by selective laser melting and in vitro biocompatibility / H. Liang, Y. Yang, D. Xie [et al.] // *Journal of Materials Science & Technology*. – 2019. – Vol. 35. – № 7. – P. 1284-1297.

417. Torres-Sanchez C. The effect of pore size and porosity on mechanical properties and biological response of porous titanium scaffolds / C. Torres-Sanchez, F. R. A. Al Mushref, M. Norrito [et al.] // *Materials Science and Engineering: C*. – 2017. – Vol. 77. – P. 219-228.

418. Morettini G. Comprehensive characterization of mechanical and physical properties of PLA structures printed by FFF-3D-printing process in different directions / G. Morettini, M. Palmieri, L. Capponi, L. Landi // *Progress in Additive Manufacturing*. – 2022. – Vol. 7. – № 5. – P. 1111-1122.

419. Vindokurov I. Compression of additively manufactured PLA for biomedical applications: Effects of test conditions on properties of solid samples / I. Vindokurov, Y. Pirogova, M. Tashkinov, V. V. Silberschmidt // *Polymer Testing*. – 2024. – Vol. 130. – P. 108320.

420. Zhianmanesh M. Fluid Permeability of Graded Porosity Scaffolds Architected with Minimal Surfaces / M. Zhianmanesh, M. Varmazyar, H. Montazerian // *ACS Biomaterials Science and Engineering*. – 2019. – Vol. 5. – № 3. – P. 1228-1237.

421. Nielson G. M. Dual marching cubes / G. M. Nielson // *IEEE Visualization 2004*. – IEEE Comput. Soc, 2004. – P. 489-496.