

РОЗРОБКА МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ДЕФОРМУВАННЯ АЕРОГЕЛЕЙ

Рикова В.О., Водка О.О., Абдусаламов Р.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків; Rhine-Westphalia Technical University, Aachen

Аерогелі – це пористі матеріали з низькою густиною, які мають унікальні властивості, такі як висока теплоізоляція, хімічна стійкість та механічна міцність. Їхні характеристики роблять їх перспективними для широкого кола застосувань, включаючи будівництво, аерокосмічну промисловість, біомедицину та інші.

Для розуміння та прогнозування поведінки аерогелів під механічними навантаженням важливо розробляти математичні моделі, що дозволять визначати параметри їх напруженого стану. Ці моделі повинні враховувати складну мікроструктуру аерогелів, а також різні механізми деформації, такі як пружна деформація, пластична деформація та руйнування. Метою роботи є розробка математичних моделей, що враховують внутрішню структуру аерогелів та технологію їх виготовлення.

У роботі представлена мікроструктура аерогелю кремнезему змодельована за допомогою алгоритму кластер-кластерної агрегації з обмеженою дифузією (DLCA). Алгоритм DLCA ґрунтується на моделюванні динаміки агрегації наночастинок кремнезему, що враховує їхній броунівський рух, дифузію та коагуляцію. Це дозволяє отримати реалістичну мікроструктуру аерогелю, яка відповідає даним експериментальних досліджень. Моделювання виконується на основі виділення репрезентативного об'єму. Це означає, що для аналізу обирається невелика частина мікроструктури, яка вважається репрезентативною для всієї структури аерогелю. Це дозволяє значно скоротити час і ресурси, необхідні для чисельного моделювання. В ході роботи удосконалено код генерації моделі мікроструктури аерогелю, реалізований у середовищі MatLAB. Розроблено макрос для реалізації моделі у програмі чисельного моделювання ANSYS. Для забезпечення цільності моделі і виключення занадто малих елементів застосований алгоритм побудови і пошуку зв'язних графів.

Розробка точних математичних моделей деформації аерогелів має важливе значення для розуміння та прогнозування поведінки цих матеріалів під навантаженням. Ці моделі можуть бути використані для оптимізації дизайну аерогелів та розширення їх сфери застосування.

Література:

1. Abdusalamov R., Adjustment of micro-structure parameters of aggregated structures for dynamic modeling of silica aerogels / Abdusalamov R., Itskov M., Kaplunov J., Prikazchikov D. // Mechanics of High-Contrast Elastic Solids. Advanced Structured Materials, vol 187. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-031-24141-3_1
2. Parmenter K. E., Milstein F. Mechanical properties of silica aerogels //Journal of non-crystalline solids. – 1998. – Т. 223. – №. 3. – С. 179-189.
3. Abdusalamov R. et al. Modeling and simulation of the aggregation and the structural and mechanical properties of silica aerogels //The Journal of Physical Chemistry B. – 2021. – Т. 125. – №. 7. – С. 1944-1950.