



## Моделирование пористого материала методом конечных элементов

А.Н. Левандовский<sup>1\*</sup>, Б.Е. Мельников<sup>2</sup>, А.А. Шамкин<sup>3</sup>

<sup>1,2</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.

<sup>3</sup>ООО "Корнинг СНГ", 194021, Санкт-Петербург, ул. Шателена, 26, лит А

### ИНФОРМАЦИЯ О СТАТЬЕ

УДК 691.3

doi: 10.18720/CUBS.53.5

### История

Подана в редакцию 09.11.2016

### Ключевые слова

Пористый материал;  
эффективный модуль упругости;  
размер пор;  
томография;  
воксель;  
разрешение;  
метод конечных элементов;  
кубические элементы;

### АННОТАЦИЯ

Использование пористых материалов в промышленном строительстве требует разработки современных неразрушающих алгоритмов исследования и оптимизации эффективных механических свойств этих материалов. В настоящей работе рассмотрен подход к вычислению эффективного модуля упругости хрупкого пористого материала. Доступные оцифрованные данные о геометрии пор образца конвертируются непосредственно в геометрию конечных элементов, строится сетка, состоящая из одинаковых конечных элементов кубической формы. Определено пороговое разрешение, которое позволяет анализировать эффективные свойства пористых материалов без существенной потери точности, что облегчит в будущем решение вопроса о представительности рассматриваемых образцов, а также позволит ускорить процесс решения подобных задач. Описываемый подход может использоваться для моделирования однородных строительных материалов, а так же материалов с включениями в отсутствие геометрических нелинейностей и в пределах линейности модели материала.

### Содержание

1.	Введение	62
2.	Постановка задачи	63
3.	Методы исследования	63
4.	Результаты исследования	64
5.	Заключение	73

#### Контакты авторов:

- 1 \* +7(904)5157287, levandovan@corning.com (Левандовский Андрей Николаевич, младший научный сотрудник)  
2 +7(812)5526303, kafedra@ksm.spbstu.ru (Мельников Борис Евгеньевич, д.т.н., профессор)  
3 +7(911)7366391, shamkinaa@corning.com (Шамкин Артемий Александрович, научный сотрудник)

## 1. Введение

Пористые материалы на основе хрупких матриц широко используются в строительстве и других инженерных приложениях. Перечислим основные типы таких структур: промышленная (строительная) керамика, в том числе химически коррозионно-стойкие материалы, кислотоупорные изделия; облицовочная керамическая плитка и керамогранит; огнеупорные материалы, кирпич, дорожный кирпич; пористые бетоны; керамзит, аглопорит, др. заполнители для легких бетонов; черепица; тигли, желоба, формы для плавки и формовки металлов, окислов, стекол, шлаков; мембраны и фильтры для механической и химической (каталитической) фильтрации жидкостей и газов [1, 2]; футерованные патрубки автомобильных систем, фильтры выхлопных газов; высокотехнологичная керамика (электронная, машиностроительная, оптоволокно и пр.); биомедицинская керамика; бытовая керамика, санитарно-технические изделия.

Использование пористых материалов в промышленном строительстве требует разработки современных неразрушающих алгоритмов исследования и прогнозирования термомеханических свойств этих материалов.

Механические свойства пористых материалов исследовались как аналитически, так и с применением численных методов и новейших экспериментальных установок.

В середине XX столетия были выведены уравнения Гассмана, связывающие между собой упругие параметры пористой среды, насыщенной жидкостью или газом [3]. Уравнения Гассмана используются в геофизике для оценки упругих свойств горных пород. В последние десятилетия был опубликован ряд работ, содержащих как теоретические, так и полуэмпирические (обобщения экспериментальных данных в виде формул) выкладки, касающиеся линейных упругих свойств пористых структур специального вида [4–9].

Численные исследования эффективных свойств многофазных, в том числе пористых структур, проводятся преимущественно с использованием метода конечных элементов (МКЭ). Идея МКЭ была сформулирована в середине прошлого столетия [10]. Существенный вклад в развитие МКЭ сделан отечественными учеными, представителями санкт-петербургской политехнической школы [11–14].

Расчеты на представительных образцах трехмерных непериодических пористых структур требуют большого объема оперативной памяти (порядка десятков гигабайт). Поэтому в большинстве опубликованных работ описывается лишь моделирование геометрических структур, преимущественно периодических, не существующих в природе, а созданных виртуально, на ЭВМ, с использованием тех или иных случайных алгоритмов [7, 15–19].

И только в течение последних лет стало возможным прямое конечно-элементное (КЭ) моделирование трехмерной структуры пористых материалов. Дело в том, что помимо серьезных вычислительных мощностей для подобного моделирования также необходимо оборудование, позволяющее оцифровывать не только поверхность материала, но и его глубинную структуру, причем делать это с очень высоким разрешением, так как размер пор может достигать порядка 10 микрон. А возможности подходов, связанных с механическим шлифованием поверхности и последовательным фотографированием отполированных сечений на различной глубине с последующим обобщением этих двумерных данных на трехмерную модель, ограничены, прежде всего, точностью механической обработки. Лишь компьютерная томография позволяет получить непосредственно всю информацию о трехмерной структуре в полноте [20]. С использованием этой информации проводится численное моделирование микроструктуры [21–24], в основном моделируются свойства костных тканей. С помощью компьютерной томографии также проводятся геологические исследования [25].

В [21, 22, 26, 27] предпринимаются попытки двумерного моделирования материалов на основе данных электронной микроскопии и спектроскопии.

Чрезвычайно редко какое-либо внимание в публикациях уделено разрешению томограмм и сходимости по сетке [17, 23].

Помимо традиционных, макроскопических экспериментальных исследований механических характеристик пористых материалов [28, 29] для исследования микроструктуры применяются и специальные, среди которых, прежде всего, надо отметить метод нейтронной дифракции [30–32, 7, 23, 33]. В настоящей работе в качестве примера такого исследования рассмотрен оцифрованный методом компьютерной томографии образец пористого материала – кордиерит.

Кордиерит  $((\text{Mg,Fe})_2\text{Al}_3[\text{Si}_5\text{AlO}_{18}])$  – материал с низким температурным коэффициентом линейного расширения, способностью противостоять резким перепадам температур, высокой химической

стойкостью, диэлектрическими свойствами. Сочетание высокой термостойкости с диэлектрическими свойствами позволяет использовать кордиеритовые изделия в качестве огнеупоров, фильтров, носителей катализаторов. Потенциальные потребители продукции кордиеритовой керамики: предприятия энергетического комплекса; промышленное строительство; эксплуатация существующих электрических сетей (изоляторы); предприятия алюминиевой промышленности, использующие в своем производстве (например, тигли) или в своей продукции (комплектующие) керамику (КрАЗ, БрАЗ, СаАЗ и др.). Российская алюминиевая промышленность в электролизерах использует традиционные огнеупорные материалы – шамот и диатомовый кирпич, в то время как в мировой практике используются алюмосиликаты с высокой долей содержания кордиерита и муллита.

## 2. Постановка задачи

Целью настоящей работы является детальное обоснование одного из подходов к КЭ моделированию микроструктуры известной геометрии, а именно, речь идет о прямом переводе оцифрованных трехмерных массивов данных томографии в геометрию конечных элементов. При этом рассматривается возможность виртуального закругления разрешения сканирования в процессе конвертации для включения в исследование как можно большего физического объема материала без существенной потери точности, что облегчит в будущем решение вопроса о представительности рассматриваемого образца, а также позволит ускорить процесс решения подобных задач.

Описываемые методы могут использоваться для моделирования любых пористых структур, в том числе однородных строительных материалов (рассматривая поры как частный случай включений, возможно обобщение на материалы с включениями) при относительно небольших деформациях (в отсутствие геометрических нелинейностей) в пределах линейности модели материала.

В качестве вспомогательных решены две модельные задачи об определении эффективных упругих характеристик квадрата с круговым вырезом и куба со сферической полостью.

Далее в различных вариациях рассматривается задача об определении упругих модулей образца кордиерита, полученного при помощи трехмерной томографии. Обосновывается возможность использования равномерной сетки, состоящей исключительно из одинаковых элементов кубической формы, проводится четкое исследование сходимости по размеру такого элемента. В дополнение приводятся диаграммы послонной пористости. Вид этих диаграмм рассматривается как альтернативный быстрый (не требующий непосредственного проведения вычислений на различных сетках) метод определения критического размера элемента.

## 3. Методы исследования

Для определения эффективных характеристик пористого образца, как в двумерном, так и в трехмерном случае, используется постановка задачи следующего вида (рис. 1). При этом эффективный модуль упругости определяется по формуле:

$$E_y = \frac{\sigma_y}{\varepsilon_y} = \frac{R_y \cdot l_y}{S_y \cdot u_y} \quad (1)$$

где

$E_y$  – эффективный модуль упругости структуры в направлении “y”,

$R_y$  – суммарная реакция опоры при растяжении образца в направлении “y”,

$l_y$  – изначальный размер образца в направлении “y”,

$S_y$  – площадь поперечного сечения образца ортогонально оси “y”,

$u_y$  – перемещение в направлении оси “y”, приложенное к соответствующей грани образца (рис. 1)

На рисунке 1 показан пример граничных условий (ГУ), соответствующих вычислению эффективного модуля упругости в направлении “y”. В трехмерной ситуации граничные условия в направлении осей “x” и “z” ставятся аналогичным образом.

В настоящей работе не делается акцент на качестве представления периодической структуры образцом ограниченного размера. Поэтому из известного многообразия возможных ГУ [34] достаточно остановиться на каком-либо одном виде. Выбираются ГУ в перемещениях (рис. 1). В пространственной задаче граничные условия в направлении оси “z” такие же, как в направлении оси “x” на рис. 1.

Необходимо отметить, что работа ведется, прежде всего, с натуральными физическими образцами, не являющимися геометрически периодическими структурами. В настоящей работе задача ставится именно в терминах определения свойств какого-то конкретного образца, а не бесконечной периодической или непериодической структуры. То есть устанавливается оптимальное разрешение томограммы и размер КЭ, которые дадут возможность вычислить или предсказать с известной степенью точности эффективные свойства данного образца с наименьшими затратами машинного времени.

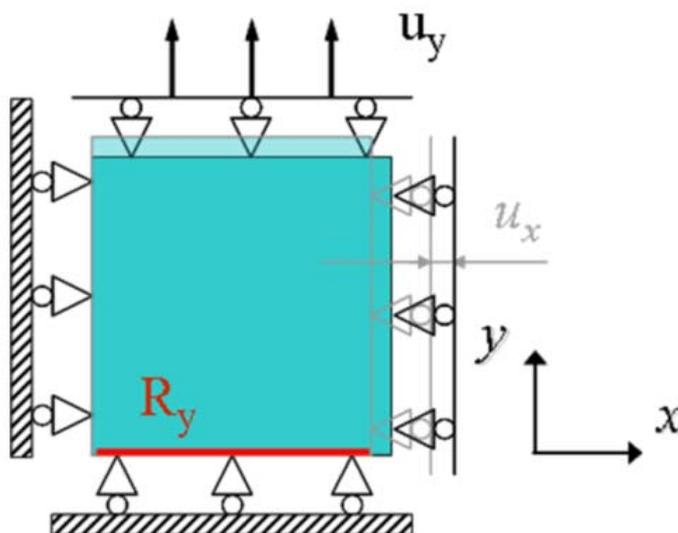


Рисунок 1. Граничные условия в двумерном случае, соответствующие вычислению эффективного модуля упругости в направлении “y”

#### 4. Результаты исследования

Задачи об одноосном растяжении квадрата и куба решаются на сетках, состоящих из одинаковых линейных конечных элементов (КЭ), квадратной и кубической формы соответственно. Решения, полученные на таких сетках, сравниваются с решениями, полученными на гладких сетках традиционного вида, в которых все внешние узлы КЭ модели располагаются точно на геометрической границе. Исследуется вопрос стабильности решения, то есть сходимости по размеру КЭ.

В плоском случае геометрия модели представляет собой квадрат с вырезанной посередине круговой областью (рис. 2). Отношение стороны квадрата к радиусу кругового выреза составляет 20 к 7, что соответствует пористости 38% для периодической пористой структуры, полученной соответствующим симметричным отображением модельной геометрии.

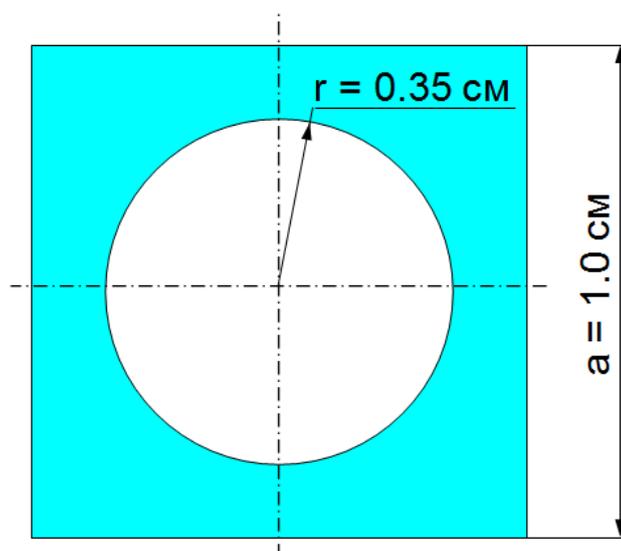


Рисунок 2. Геометрия двумерной модели квадрата с круговым вырезом

Задача решается в предположении плоского напряженного состояния с использованием сеток двух типов: регулярной сетки, созданной на базе указанной геометрии (все внешние узлы лежат точно на границе геометрической области), и сетки, состоящей исключительно из элементов квадратной формы. Причем в последнем случае сетка либо полностью покрывает границу круговой области при условии минимума площади КЭ модели, либо не пересекается с ней вовсе при условии максимума площади КЭ модели (рис. 5, 6).

Результаты вычислений эффективного упругого модуля структуры в направлении, параллельном стороне квадрата (рис. 2), отнесенные к модулю упругости сплошного материала приведены на рисунках 3–6. График на рисунке 3 представляет собой зависимость результата от общего числа узлов в модели. Отметим, что такое часто встречающееся представление результата исследования сходимости по сетке, не является показательным. В том смысле, что по подобным графикам в общем случае (при наличии, к примеру, лишь одной кривой, соответствующей сетке одного типа) ничего нельзя сказать ни о порядке аппроксимации, ни о величине погрешности численного решения. Так как, во-первых, кривая зависимости решения от числа узлов или числа степеней свободы будет убывать со скоростью, обратно пропорциональной размерности задачи, и, во-вторых, невозможно будет оценить степень близости к пределу вычислений при бесконечно малом размере элемента. С первой проблемой можно бороться, представляя результаты в форме зависимости от числа узлов или КЭ на единицу длины (рис. 4). Однако в смысле оценки качества сходимости по величине шага сетки и такое представление не будет эффективным. Поэтому в настоящей работе рассматриваются зависимости именно от размера элемента (отнесенного к характеристическому линейному размеру модели  $a$  (рис. 5–6).

Как показал численный эксперимент, решения, полученные на различных сетках, стремятся к одному и тому же результату при измельчении сетки, несмотря на наличие локальных сингулярностей в постановке с квадратными элементами (рис. 3–6). Причем имеет место монотонная, близкая к линейной зависимость последовательностей решений на различных сетках от размера КЭ. Монотонность нарушается лишь в малой окрестности нуля, что объясняется относительно резкими колебаниями качества описания границы сетками указанных типов. Однако в этой окрестности колебания решения уже становятся несущественны (менее 0.5%).

При больших же значениях размера элемента монотонность сохраняется вплоть до предельных значений, когда на всю толщину стенки поры приходится лишь один КЭ. Для грубых КЭ сеток рассматриваемые последовательности решений имеет смысл аппроксимировать прямой линией, пересечение которой с осью ординат принимается за предел последовательности при стремлении размера КЭ к нулю.

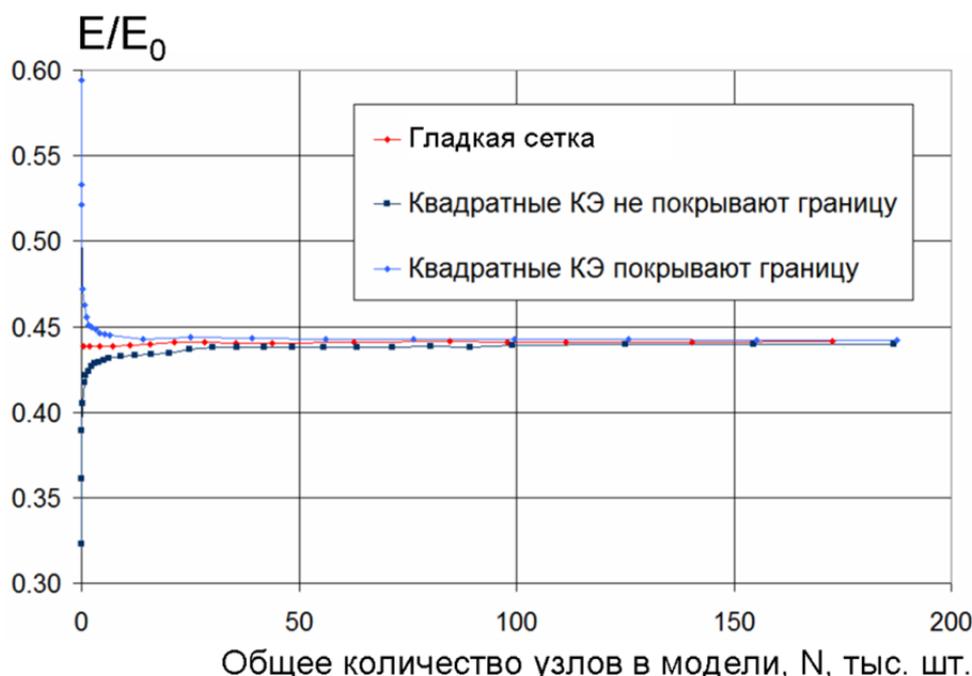


Рисунок 3. Зависимость относительного модуля упругости от количества узлов в КЭ модели на сетках трех типов

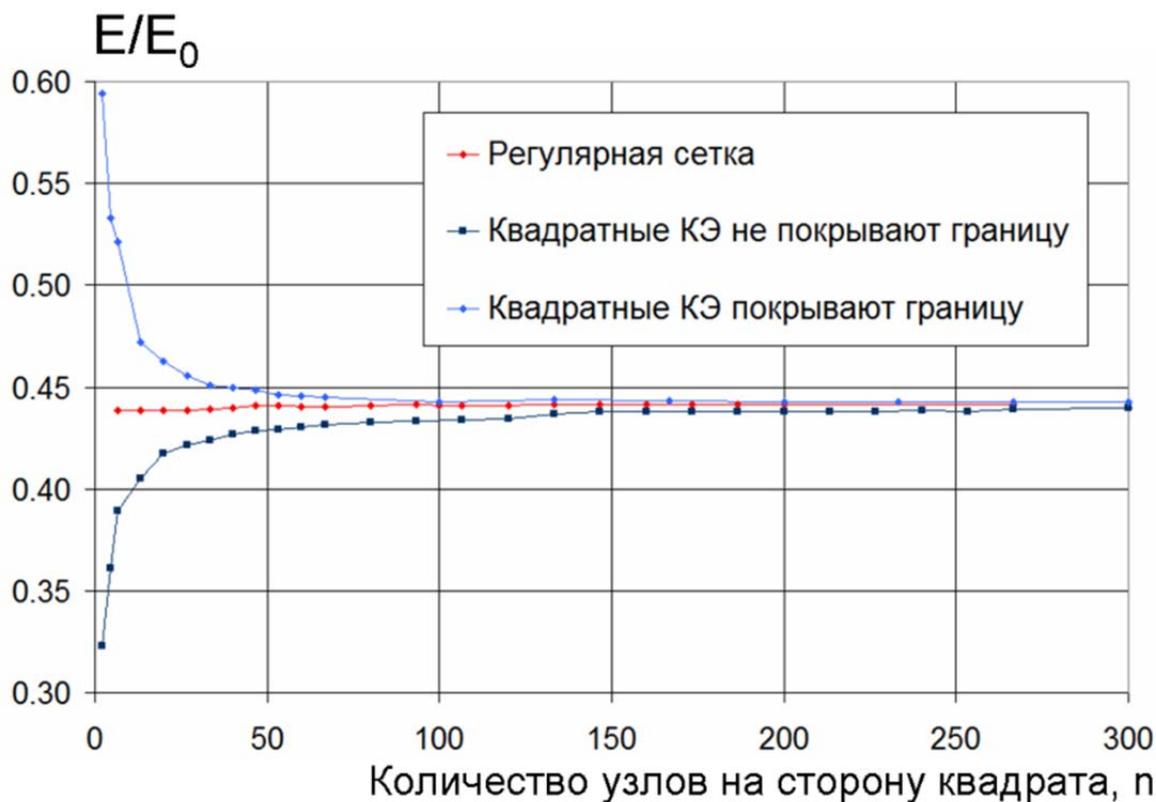


Рисунок 4. Зависимость решения задачи относительного модуля упругости от количества элементов на сторону квадрата на сетках трех типов

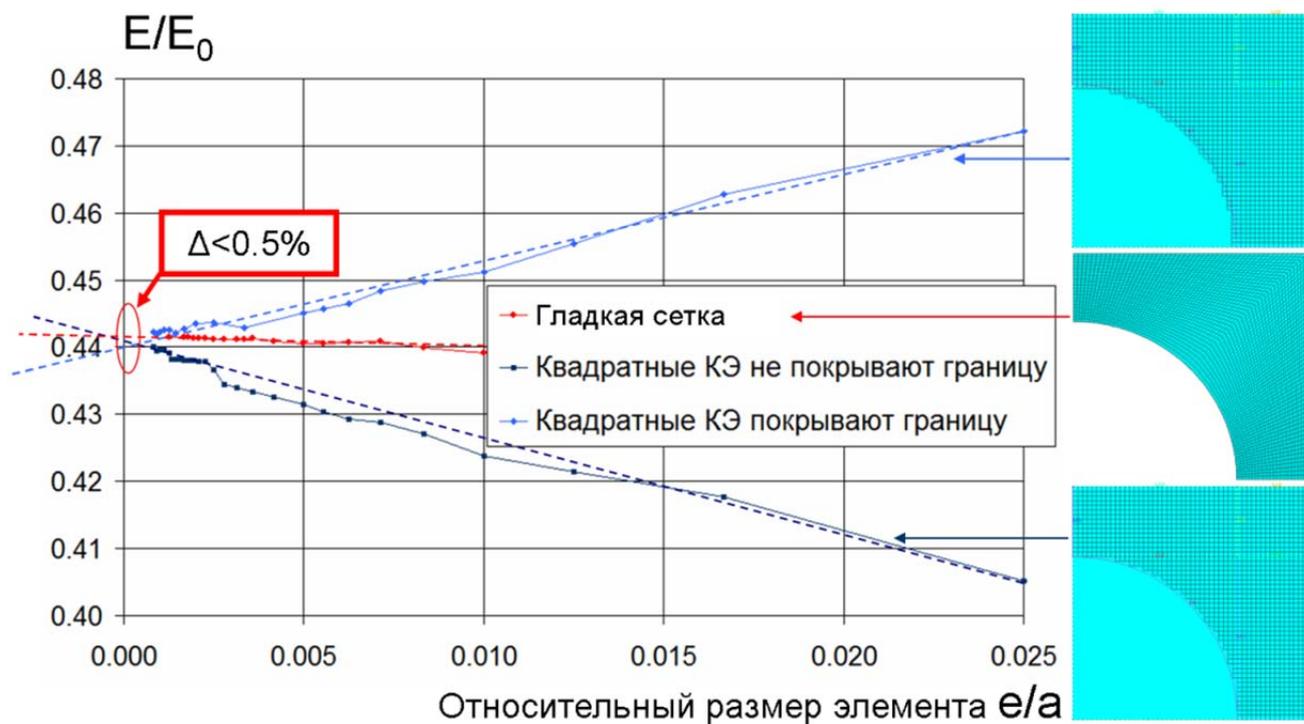
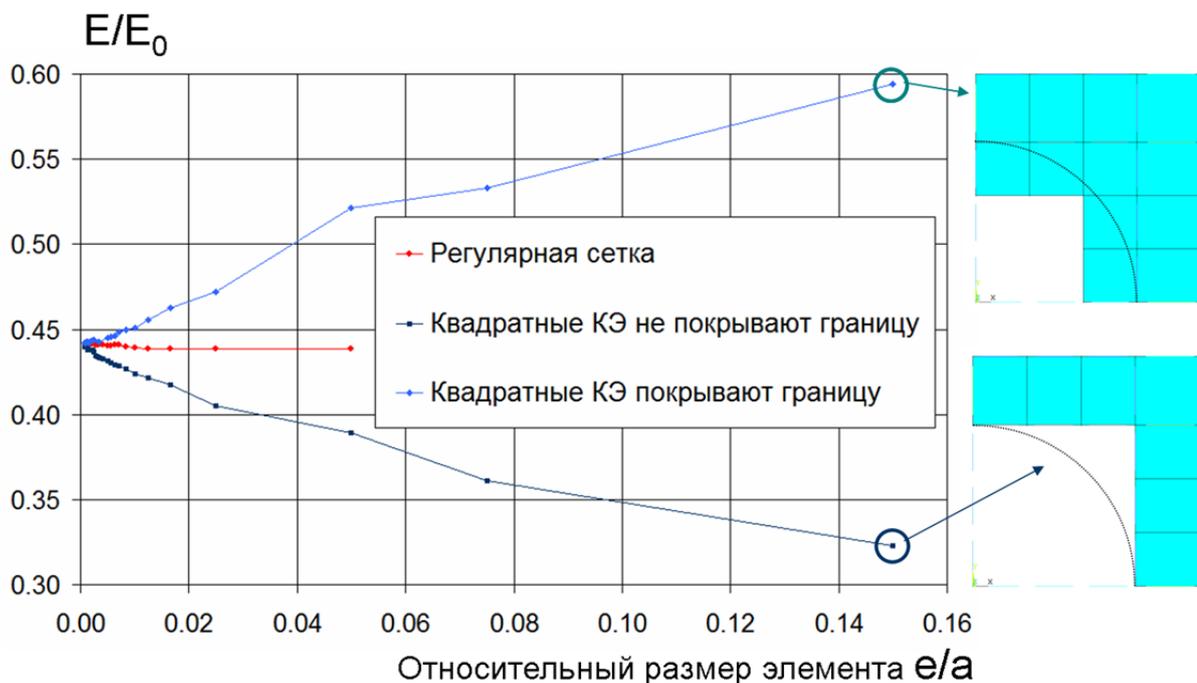


Рисунок 5. Зависимость относительного модуля упругости от отношения размера КЭ к линейному размеру модели



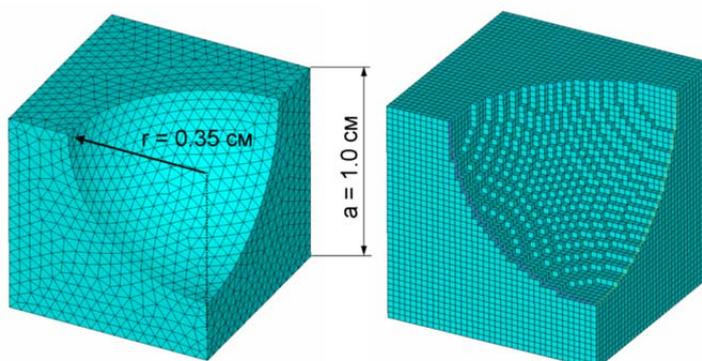
**Рисунок 6. Зависимость относительного модуля упругости от отношения размера КЭ к линейному размеру модели для КЭ больших размеров**

Объемная тестовая задача представляет из себя куб с вырезанной в середине сферической полостью (рис. 7). Отношение длины ребра куба к радиусу полости составляет 20 к 7, что соответствует пористости 18% для периодической пористой структуры, полученной соответствующим симметричным отображением модельной геометрии. Решается задача об определении эффективного упругого модуля в направлении, параллельном одному из ребер куба, на сетках трех видов:

- сетке, состоящей из тетраэдров, все внешние узлы которых принадлежат геометрической границе;
- и сетках, состоящих из одинаковых элементов кубической формы, покрывающих границу либо не пересекающихся с ней, при условии соответственно минимума или максимума объема КЭ модели.

На рис. 8–9 показаны зависимости вычисленного относительного упругого модуля от количества узлов в модели и количества элементов на ребро куба соответственно.

На рис. 10 показаны зависимости решений от размера элемента. Видно, что все три зависимости (для гладкой сетки и сеток, состоящих из элементов кубической формы) монотонны и близки к линейным. Таким образом, каждая из трех последовательностей решений может быть аппроксимирована прямой линией, пересечение которой с осью ординат принимается за предел последовательности при стремлении размера КЭ к нулю. Теоретически линейность рассматриваемых зависимостей, как на плоскости, так и в объеме, является следствием того, что при решении всех задач используются КЭ первого порядка. Прямое практическое подтверждение линейности зависимости решения от величины шага по сетке, полученное на тестовых задачах, позволяет перейти к моделированию реальных трехмерных пористых структур на сетках аналогичного вида.



**Рисунок 7. Геометрия и КЭ сетка различных типов для трехмерной тестовой модели**

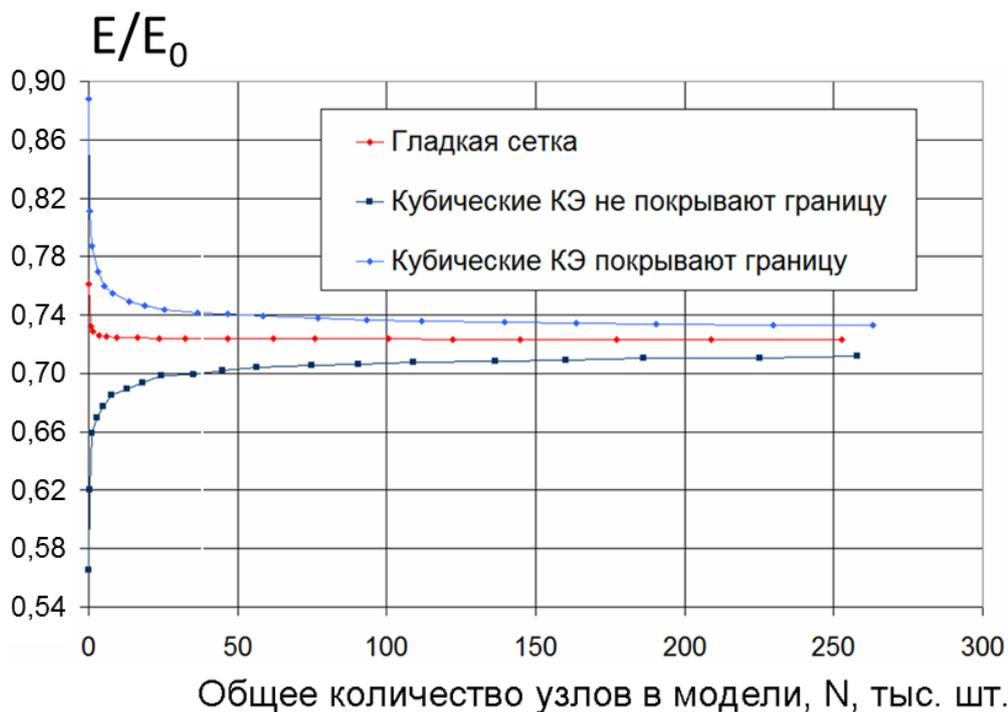


Рисунок 8. Зависимость относительного модуля упругости от количества узлов в КЭ модели на сетках трех типов

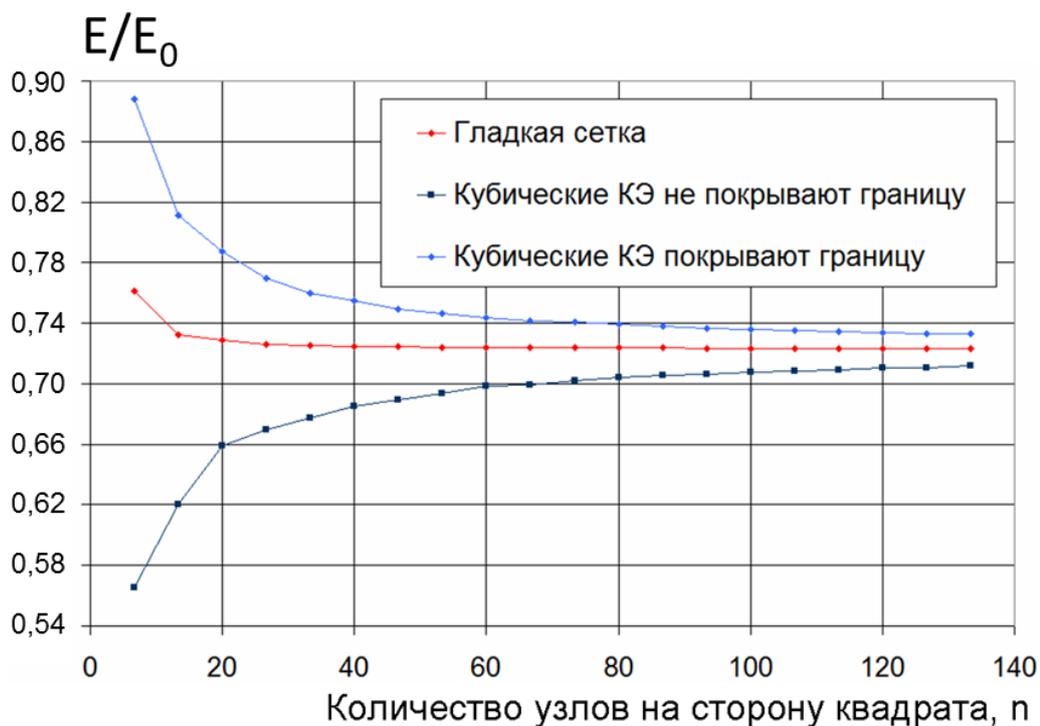
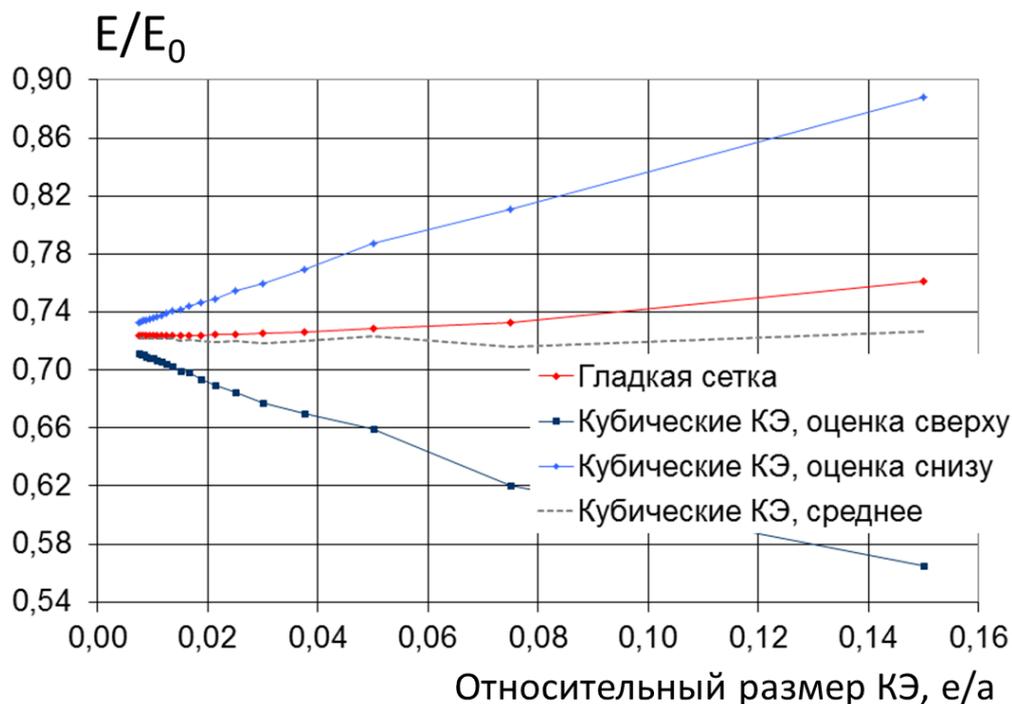


Рисунок 9. Зависимость относительного модуля упругости от количества элементов на сторону куба на сетках трех типов



**Рисунок 10. Зависимость относительного модуля упругости от отношения размера КЭ к линейному размеру модели**

При моделировании основной пространственной задачи используются данные трехмерной томограммы образца пористого кордиерита JR1. Медианный средний размер пор в данном образце составляет 22 микрона  $D_{50} = 22.0 \mu\text{m}$ . Изначальное разрешение томограммы – 1.12 микрона.

Для упрощения дальнейшего изложения введем понятие «воксель» (от англ. «voxel», сокращение «volumetric pixel» – объемный пиксель, или «Volumetric Picture Element» – элемент объемного изображения). Воксель – это элемент объема, представляющий значение какой-либо величины на регулярной сетке в трехмерном пространстве. В настоящей работе предполагается, что воксели имеют кубическую форму и представляют собой какой-либо материал или вакуум (пору) в соответствии с данными компьютерной томографии. Причем размер вокселя (длина ребра куба) численно равен разрешению томограммы. Таким образом, данные томографии представляют собой описание набора вокселей с указанием позиций их центров в пространстве и кода материала, заполняющего каждый воксель.

В качестве исходной используется КЭ модель, полученная прямой конвертацией исходных вокселей, соответствующих твердой фазе, в конечные элементы. Следует отметить, что геометрия КЭ модели, полученная указанным образом, является наиболее естественной, поскольку выходными данными компьютерной томографии являются именно массивы вокселей, а не, к примеру, кусочно-аналитическое представление геометрии пор. Дополнительных данных о гладкости границы изначально не имеется. Иными словами, если из каких-либо других источников нет информации о гладкости поверхности пор в рассматриваемом масштабе (неизвестно, что происходит в промежутке между соседними вокселями на поверхности), нет и оснований для того, чтобы строить какие-либо «сглаженные» КЭ модели. Остается открытым лишь вопрос о том, следует ли разбивать каждый воксель на несколько КЭ.

Далее для структуры JR1 проведено моделирование сканирования с более грубым разрешением. Первоначальные воксели с длиной ребра 1.12 микрона сгруппированы в воксели большего размера (с длиной ребра кратно большей 1.12, т.е. 2.24, 3.36, 4.48 и т.д.). Каждому новому вокселю присвоены свойства твердого материала или поры в зависимости от количества материала в нем.

В процессе отнесения нового, «загрубленного» вокселя к тому или иному материальному типу (твердая фаза или пора) учитывается (известная) пористость всего образца. Поскольку размер ребра нового вокселя принимает лишь дискретные значения, кратные 1.12, возникает ситуация, когда часть полученных новых вокселей с определенным внутренним содержанием твердой фазы (например, 50% для случая 2.24-микронных вокселей – загрубленные воксели, содержащие в себе по 4 оригинальных 1.12-микронных вокселя, соответствующих твердой фазе и порам) должна быть отнесена к порам, а

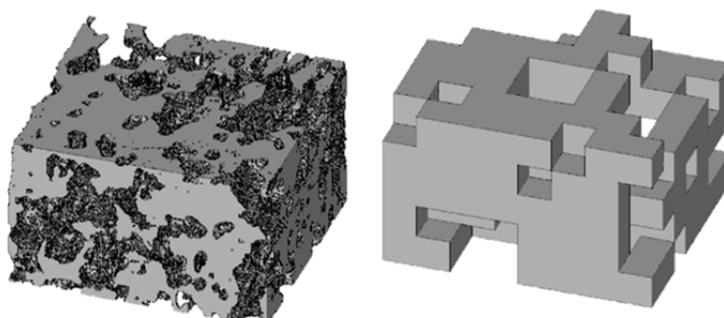
другая часть – к твердой фазе. Соотношение этих частей должно равняться пористости образца с тем, чтобы пористость образца при загрузке изменилась не больше, чем на объем одного нового вокселя, отнесенный к объему всей структуры, включая поры.

На структуре JR1 проведены три серии численных экспериментов (рис. 11–12):

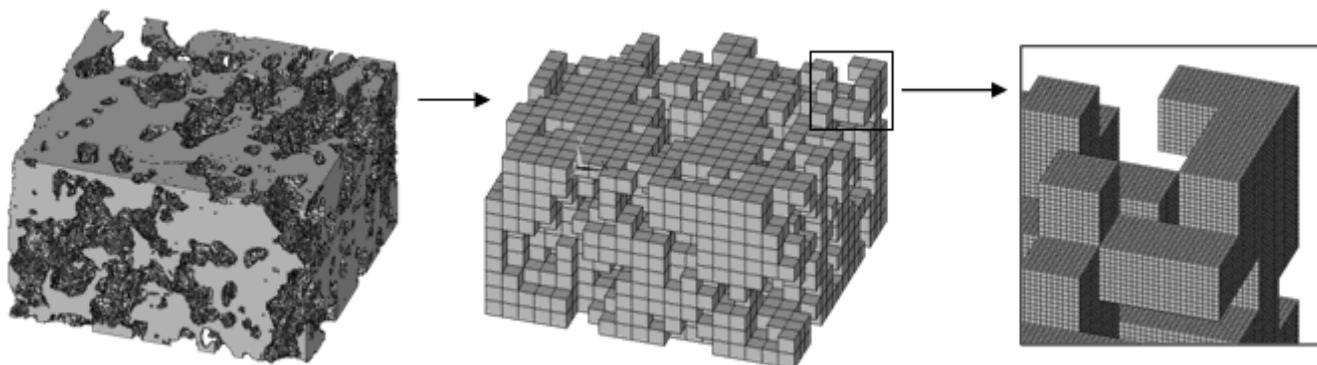
1. с одновременным загрузкой геометрии модели (вокселей) и элементов сетки (конечных элементов КЭ);
2. с загрузкой вокселей при неизменной величине КЭ;
3. с измельчением КЭ сетки при фиксированной выбранной геометрии.

Для каждого случая методом конечных элементов вычисляется эффективный модуль упругости образца в соответствии с постановкой задачи, показанной на рис. 1. Кроме того, предлагается дополнительный метод оценки качества загруженной структуры, заключающийся в анализе диаграмм пористости сечений (последовательной пористости или последовательной плотности).

Как будет показано ниже, результаты данных вычислений позволят сделать вывод не только о размере КЭ сетки, но и о разрешении трехмерного сканирования, необходимом и достаточном для адекватной оценки эффективных модулей упругости пористого образца.



**Рисунок 11. Оригинальная геометрия структуры (оригинальные воксели 1.12 микрон) и геометрия, загруженная в 25 раз (размер вокселя 28 микрон)**



**Рисунок 12. Оригинальная геометрия структуры (воксели 1.12 микрон), геометрия, загруженная в 11 раз (воксели 12.32 микрон) и загруженная геометрия, разбитая на конечные элементы меньшего размера вплоть до размера, равного величине оригинального вокселя (12,32...1,12 микрон)**

Помимо прямого КЭ моделирования, предлагается метод оценки качества загруженной структуры (оценки разрешения сканирования, достаточного для адекватного представления структуры дискретизированной численной моделью) путем анализа последовательной плотности («двумерной пористости» сечений структуры) в оригинальной и загруженной структурах. В каждом сечении вдоль осей  $x$ ,  $y$  и  $z$  подсчитывается количество вокселей твердой фазы, и это количество делится на площадь сечения. На основании полученных диаграмм последовательной плотности для одной и той же структуры, представленной в различных (смоделированных) разрешениях, можно сделать вывод об адекватности представления геометрии структуры более или менее крупными вокселями. Ниже приведены графики изменения

послойной плотности вдоль осей «х», «у» и «z» (рис. 13–14). По оси абсцисс всюду отложено относительное расстояние от плоскости сечения до начала координат.

Как видно из первого графика (рис. 13), соответствующего оригинальному разрешению, послойная плотность меняется достаточно плавно, то есть на каждый изгиб кривой приходится как минимум несколько точек. Значит принципиального снижения качества представления структуры не должно последовать и в случае некоторого закругления рассматриваемой сетки. Причем закруглять можно до момента, пока не начнут изменяться значения экстремумов рассматриваемой кривой. При этом гораздо важнее изменение минимумов, нежели чем изменение максимумов. Ведь в случае, к примеру, обнуления всех элементов хотя бы в одном из слоев эффективная упругость всего образца в соответствующем направлении немедленно падает до нуля. При этом даже предельное уплотнение одного слоя (когда все воксели в слое примут свойства твердой фазы) не повлечет за собой существенного изменения модуля упругости в соответствующем (ортогональном плоскости слоя) направлении. Таким же образом при одновременном обнулении одного из слоев предельное уплотнение любого другого уже ничего не изменит в нашей модели, влияние обнуления будет исключительным.

Таким образом, анализ диаграмм послойной плотности приводит к выводу о предельно допустимом разрешении сканирования для нашей структуры, которое не должно повлечь за собой качественного изменения смоделированных свойств. Последняя диаграмма, которая все еще содержит основные минимумы послойной плотности, – это диаграмма, соответствующая разрешению 22.4 микрона (рис. 14), то есть десятикратному закруглению. А вот дальнейшее закругление приводит к кардинальной потере информации, сглаживанию или слиянию экстремумов, приближению кривой к горизонтальной прямой линии, соответствующей значению объемной пористости. При закруглении вплоть до 22.4 микрона изменение смоделированных свойств будет предсказуемо. То есть произвольных качественных скачков происходить не будет; будет наблюдаться лишь монотонное предсказуемое количественное изменение параметров в ограниченном диапазоне. В этом смысле разрешение в 22.4 микрона является необходимым и достаточным разрешением трехмерного сканирования для рассматриваемой структуры.

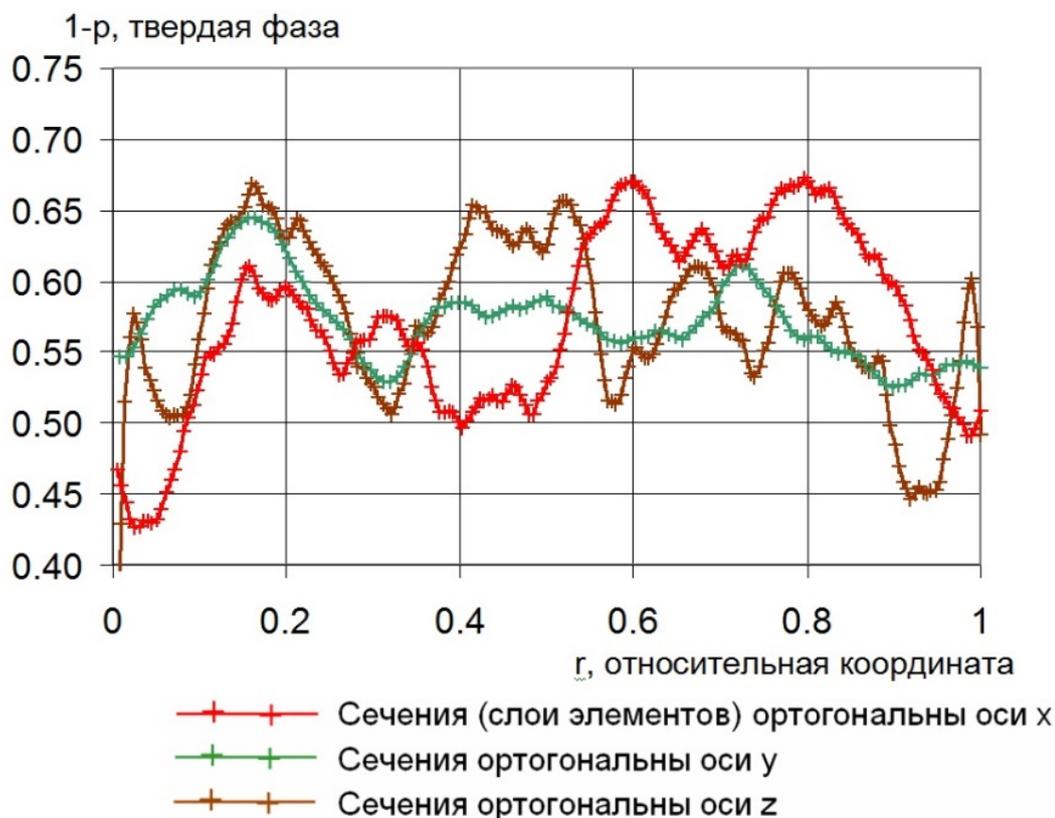


Рисунок 13. Оригинальная структура. Размер вокселя 1.12 микрон

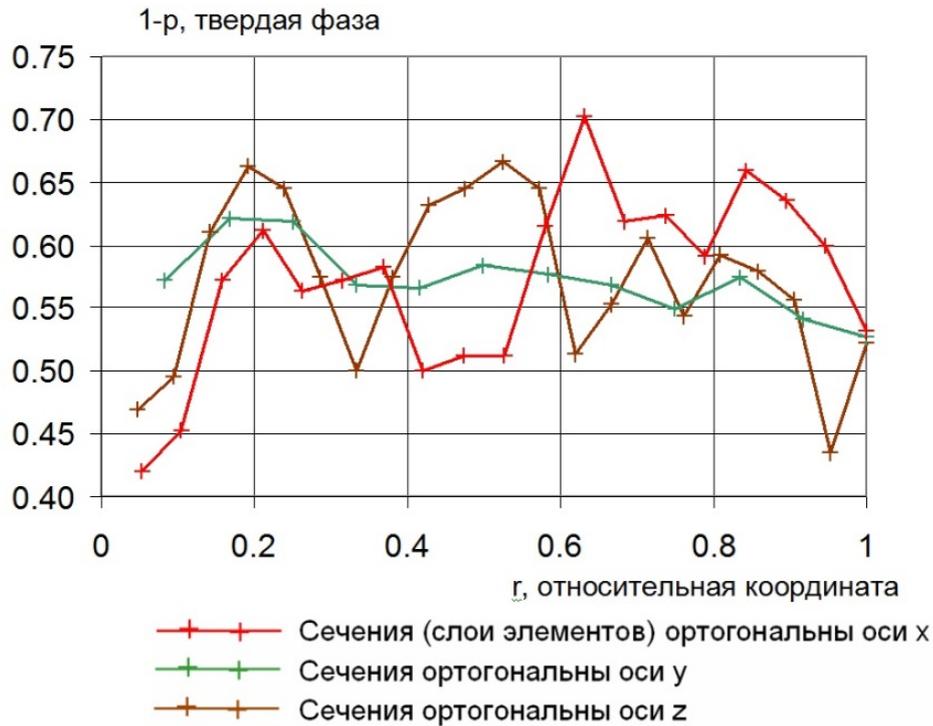


Рисунок 14. Заглубление в 10 раз. Размер вокселя 22.4 микрон

Далее для всех сгенерированных структур был посчитан относительный модуль упругости в одном из направлений – «x». Результаты вычислений представлены на графике ниже (рис. 15), где синяя кривая соответствует серии 1, желтая – серии 2, красные линии соответствуют вычислениям типа серии 3 (сплошные линии – для размера вокселя 11.2 и 22.4 микрон, пунктирная – гипотетическая зависимость, соответствующая размеру вокселя 29.12).

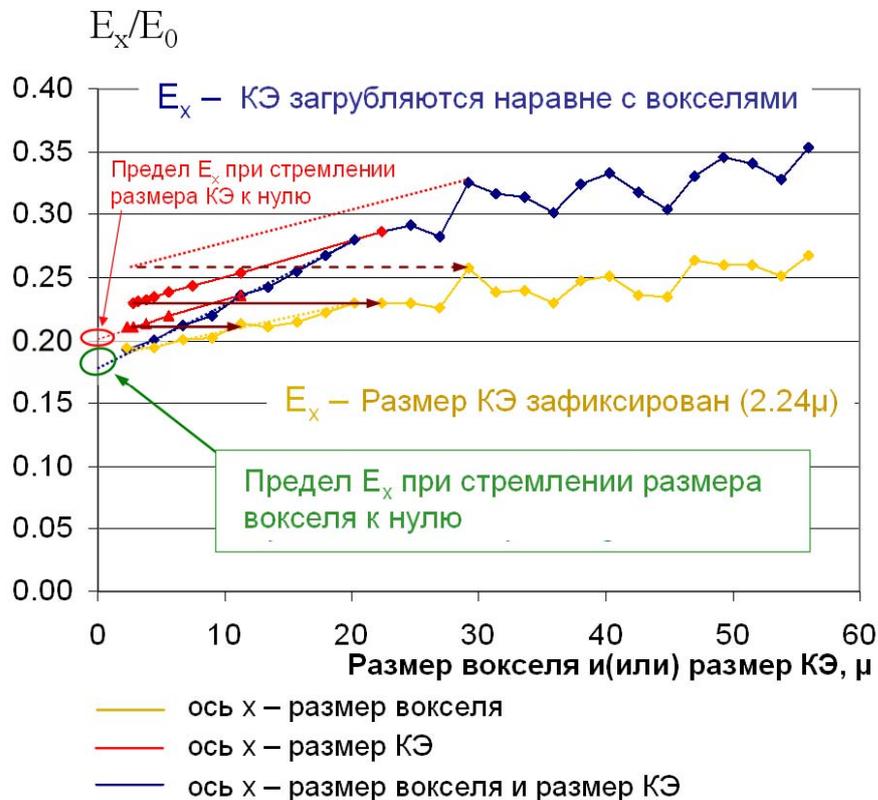


Рисунок 15. Эффективные модули упругости образца JR1, посчитанные с использованием различных разрешений и сеток

На графике (рис. 15) видно, что при размере вокселя большем 22.4 микрон, поведение вычисляемого эффективного модуля упругости становится нестабильным. При меньшем же размере вокселей вычисленный модуль упругости зависит от разрешения сканирования монотонно и почти линейно.

То есть при сканировании с разрешением меньшим, чем 22.4 микрона, возможно проведение адекватного численного анализа эффективных характеристик рассматриваемой структуры. Аналогичный вывод сделан и по диаграммам послойной плотности. Причем при наличии хотя бы двух точек в области левее 22.4 микрон (рис. 15) методом линейной аппроксимации можно оценить предел вычисленного эффективного модуля упругости при стремлении разрешения сканирования к нулю.

С учетом того, что рассмотренные структуры включают в себя основные типы пограничных поверхностей (плоские поверхности, углы и скругления), вывод о достаточности разрешения можно распространить и на произвольную пористую структуру. Необходимо отнести указанное разрешение в 22.4 микрон к среднему размеру пор в структуре (22 микрон). В таком случае вывод о качестве представления структуры оцифрованными данными заданного разрешения будет звучать следующим образом: при использовании КЭ моделей, полученных прямой конвертацией данных томограмм в КЭ, стабильность результатов численного моделирования пористой структуры обеспечивается разрешением сканирования, меньшим по величине среднего размера пор.

Сделанные выводы непосредственно обобщаются на случай произвольных многофазных структур. При этом в качестве приемлемого выбирается такое разрешение сканирования, которое обеспечивает равенство:

$$V < D50_{\min},$$

где  $V$  – размер вокселя,  $D50_{\min}$  – наименьший из характерных (медиальных средних) размеров, определяемых для каждой фазы в отдельности.

Дополнительные экспериментальные подтверждения изложенных выводов можно найти, например, в работе [23].

## 5. Заключение

1. Предложен универсальный метод построения КЭ моделей, состоящих исключительно из одинаковых элементов кубической формы.
2. Описанный метод может использоваться для моделирования пористых конструкционных материалов, а также материалов с включениями.
3. Сделан вывод о качестве представления структуры оцифрованными данными заданного разрешения: стабильность результатов численного моделирования пористой структуры обеспечивается разрешением, меньшим по величине среднего размера пор.

## Литература

- [1] Кривошапкина Е.Ф., Кривошапкин П.В., Дудкин Б.Н. Микропористая керамика кордиеритового состава на основе природного сырья. 2011. № 7. С. 27–32; УДК 546.05.549.057.
- [2] Соловьев С.А. Окислительная конверсия метана на структурированных катализаторах Ni–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Кордиерит // Катализ в промышленности. 2011. № 4. С. 31–42; УДК 547.211: 542.943.
- [3] Gassmann F. Uber Die elastizitat poroser medien // Vier der Natur Gesellschaft. 1951. N 96. P.1–23.
- [4] Kachanov M., Tsukrov I., Shafiro B. Effective Moduli of Solids With Cavities of Various Shapes // Applied Mechanics Reviews. 1994. Vol. 47(1S). P. 151–174; doi:10.1115/1.3122813.
- [5] Kachanov M., Sevostianov I., Shafiro B. Explicit cross-property correlations for porous materials with anisotropic microstructures // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2001. Vol. 49(1). P. 1–25.
- [6] Knudsen F.P. Dependence of Mechanical Strength of Brittle Polycrystalline Specimens on Porosity and Grain Size // Journal of the American Ceramic Society Volume. 1959. Vol. 42(8). P. 376–387.
- [7] Bruno G., Efremov A.M., Levandovskiy A.N., Clausen B. Connecting the macro- and microstrain responses in technical porous ceramics: modeling and experimental validations // Journal of Materials Science. 2011. Vol. 46(1). P. 161–173; doi:10.1007/s10853-010-4899-0.
- [8] Roberts A., Garboczi E.J. Elastic properties of model porous ceramics // Journal of the American Ceramic Society. 2000. Vol. 83(12). P. 3041–3048.
- [9] Шмитько Е.И., Резанов А.А., Бедарев А.А. Мультипараметрическая оптимизация структуры ячеистого силикатного бетона // Инженерно-строительный журнал. 2013. № 3. С. 15–23.

- [10] Courant R., Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations // Bulletin of American Mathematic Society. 1943. Vol. 49. P. 1–23.
- [11] Галеркин Б.Г. Собрание сочинений. Том I. М.: Издательство АН СССР, 1952. 391 с.
- [12] Тимошенко С.П., Войновский-Кригер С. Пластины и оболочки. М.: Наука, 1966. 635 с.
- [13] Розин Л.А. Стержневые системы как системы конечных элементов. Л.: Изд-во ЛГУ, 1976. 232 с.
- [14] Ашейчик А.А., Полонский В.Л. Расчёт деталей машин методом конечных элементов. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2016. 243 с.
- [15] Roberts A.P., Garboczi E.J. Elastic properties of model random three-dimensional open-cell solids // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2002. Vol. 50(1). P. 33–55.
- [16] Roberts A., Garboczi E.J. Computation of the linear elastic properties of random porous materials with a wide variety of microstructure // Proceedings of the Royal Society. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2002. Vol. 458(2021). P. 1033–1054; ISSN 1364-5021; doi:10.1098/rspa.2001.
- [17] Charles P. Ursenbach Simulation of elastic moduli for porous materials // CREWES Research Report. 2001. Vol. 13. P. 83–98.
- [18] Штерн М.Б., Кузьмов А.В., Фролова Е.Г., Вдовиченко А.В. Исследование упругого поведения порошковых материалов с плоскими порами методом прямого компьютерного моделирования на элементарной ячейке // Наукові нотатки Збірник наукових праць. 2005. № 17. С. 390–398; УДК 621.762.
- [19] Garboczi E.J., Day A.R. An algorithm for computing the effective linear elastic properties of heterogeneous materials: 3D results for composites with equal phase Poisson ratios // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1995. Vol. 43. P. 1349–62.
- [20] Разина И.С., Семенова С. Г., Саттаров А. Г., Мусин И. Н. Применение микротомографии для исследования новых материалов. Обзор // Вестник Казанского государственного технологического университета. Казань: Изд-во Казанского государственного технологического университета; 2013. Т. 16, вып. 19. С. 163–169; УДК 620.1:622.23.05:62-408:678; ISSN 1998-7072.
- [21] Garboczi E.J. Bentz D.P., Martys N.S. Digital images and computer modeling in "Methods of the Physics of Porous Media" // Ed. P.-z. Wong. San Diego: Academic Press, 1999. Vol. 35(1). P. 1–41.
- [22] Garboczi E.J. Finite element and finite difference programs for computing the linear electric and elastic properties of digital images of random materials [Электронный ресурс] Систем. требования: Adobe Acrobat Reader. URL: ftp://ftp.nist.gov/pub/bfrl/garbocz/DFEMANUAL/MANUAL.pdf (дата обращения: 20.11.2016)
- [23] Levandovskiy A.N., Efremov A.M., Bruno G. Macro to micro stress and strain conversion in porous ceramics // Materials Science Forum. 2012. Vol. 706–709. P. 1667–672.
- [24] Emerson J.E., Matt J.C., Reilly G.C., Amaka C. Offiah Geometrically accurate 3D FE models from medical scans created to analyse the causes of sports injuries // Procedia Engineering. 2011. Vol. 13. P. 422–427.
- [25] Рощин П.В., Рогачев М.К., Васкес Карденас Л.К., Кузьмин М.И., Литвин В.Т., Зиновьев А.М. Исследование ядерного материала Печерского месторождения природного битума с помощью рентгеновского компьютерного микротомографа SKYSCAN 1174V2 // Международный научно-исследовательский журнал. 2013. № 8(15), часть 2. С. 45–48; ISSN 2303-9868.
- [26] Yiotis A.G., Kainourgiakis M.E., Eustathios S. Kikkinides, Stubos A.K. Application of the Lattice-Boltzmann method to the modeling of population blob dynamics in 2 D porous domains. // Computers & Mathematics with Applications. April 2010. Vol. 59(7). P. 2315–2325.
- [27] Mo L.T., Huurman M., Wu S.P., Molenaar A.A.A. 2D and 3D meso-scale finite element models for ravelling analysis of porous asphalt concrete // Finite Elements in Analysis and Design. 2008. Vol. 44(4). P. 186–196; ISSN 0168-874X.
- [28] Горшков А.С., Ватин Н.И. Свойства стеновых конструкций из ячеистобетонных изделий автоклавного твердения на полиуретановом клею // Инженерно-строительный журнал. 2013. № 5. С. 5–19.
- [29] Горшков А.С., Ватин Н.И. Инновационная технология возведения стеновых конструкций из газобетонных блоков на полиуретановый клей // Строительство уникальных зданий и сооружений. 2013. № 8. С. 20–28.
- [30] Никитин А.Н., Иванкина Т.И., Соболев Г.А., Шефцук К., Фришбуттер А., Вальтер К. Нейтроннографические исследования внутрикристаллических деформаций и напряжений в образце мрамора при повышенных температурах и внешних механических нагрузках // Физика Земли. М.: Наука, 2004. № 1. С. 88–92.
- [31] Frishbutter A, Neov D, Scheffzu`k C, Vrana M, Walther K. Lattice strain measurements on sandstones under load using neutron diffraction // Journal of Structural Geology. November 2000. Vol. 22(11–12). P. 1587–1600; ISSN 0191-814.
- [32] Darling T.W, TenCate J.A, Brown D.W., Clausen B., Vogel S.C. Neutron diffraction study of the contribution of grain contacts to nonlinear stress-strain behavior // Geophysical Research Letters. August 2004. Vol. 31(16/L16604). P. 1–4; doi:10.1029.
- [33] Bruno G., Efremov A.M., Levandovskiy A.N., Pozdnyakova I., Hughes D.J., Clausen B. Thermal and Mechanical Response of Industrial Porous Ceramics // Materials Science Forum. 2010. Vol. 652. P. 191–196; doi:10.4028.
- [34] Kouznetsova V.G. Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials: doctoral dissertation: 9.12.02 / Kouznetsova Varvara. Eindhoven, 2002. 134 p.

## Porous material modeling with finite element method

A.N. Levandovskiy<sup>1</sup>, B.E. Melnikov<sup>2</sup>, A.A. Shamkin<sup>3</sup>

<sup>1,2</sup>Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>3</sup>OOO "Corning SNG", 26A Shatelena st., St. Petersburg, Russia, 194021

---

### ARTICLE INFO

scientific article

doi: 10.18720/CUBS.53.5

### Article history

Received 09.11.2016

### Keywords

Porous material;  
effective elastic modulus;  
pore size;  
tomography;  
voxel;  
resolution;  
finite element method;  
cubic elements;

---

### ABSTRACT

Wide use of various porous materials in construction engineering applications requires development of up to date methods of non-destructive characterization and optimization of such materials. This work explores an approach to effective elastic modulus calculation of a brittle porous material. Available 3D digital data on the specimen geometry is converted into finite element uniform mesh consisting purely of elements of cubic shape. The resolution limit is determined that allows for analysis of effective properties of porous materials without a significant loss of accuracy. This should facilitate resolving the question on the representativeness of the specimens considered and also increase the speed of the solution process for similar tasks. The approach described can be used for modeling of uniform construction materials, also materials with inclusions under the assumptions of geometrical and material linearity.

---

#### Contact information:

- 1 \* +7(904)5157287, levandovan@corning.com (Andrey Levandovskiy, Research assistant)  
2 +7(812)5526303, kafedra@ksm.spbstu.ru (Boris Melnikov, PhD., Professor)  
3 +7(911)7366391, shamkinaa@corning.com (Artemiy Shamkin, Research associate)

## References

- [1] Krivoshapkina Ye.F., Krivoshapkin P.V., Dudkin B.N. Mikroporistaya keramika kordiyeritovogo sostava na osnove prirodnogo syrya. 2011. No 7. Pp. 27–32; UDK 546.05,549.057.
- [2] Solovyev S.A. Okislitel'naya konversiya metana na strukturirovannykh katalizatorakh Ni–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Kordiyerit. Kataliz v promyshlennosti. 2011. No 4. pp. 31–42; UDK 547.211: 542.943.
- [3] Gassmann F. Uber Die elastizitat poroser medien. Vier der Natur Gesellschaft. 1951. No 96. Pp.1–23.
- [4] Kachanov M., Tsukrov I., Shafiro B. Effective Moduli of Solids With Cavities of Various Shapes. Applied Mechanics Reviews. 1994. Vol. 47(1S). P. 151–174; doi:10.1115/1.3122813.
- [5] Kachanov M., Sevostianov I., Shafiro B. Explicit cross-property correlations for porous materials with anisotropic microstructures. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2001. Vol. 49(1). P. 1–25.
- [6] Knudsen F.P. Dependence of Mechanical Strength of Brittle Polycrystalline Specimens on Porosity and Grain Size // Journal of the American Ceramic Society Volume. 1959. Vol. 42(8). P. 376–387.
- [7] Bruno G., Efremov A.M., Levandovskiy A.N., Clausen B. Connecting the macro- and microstrain responses in technical porous ceramics: modeling and experimental validations. Journal of Materials Science. 2011. Vol. 46(1). P. 161–173; doi:10.1007/s10853-010-4899-0.
- [8] Roberts A., Garboczi E.J. Elastic properties of model porous ceramics. Journal of the American Ceramic Society. 2000. Vol. 83(12). P. 3041–3048.
- [9] Shmitko Ye.I., Rezanov A.A., Bedarev A.A. Multiparametricheskaya optimizatsiya struktury yacheistogo silikatnogo betona [Multiparameter structure optimization of the cellular silicate concrete]. Magazine of Civil Engineering 2013. No 3. Pp. 15–23 (rus)
- [10] Courant R., Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. Bulletin of American Mathematic Society. 1943. Vol. 49. P. 1–23.
- [11] Galerkin B.G. Sobraniye sochineniy. Tom I. M.: Izdatelstvo AN SSSR, 1952. 391 c.
- [12] Timoshenko S.P., Voynovskiy-Kruger S. Plastiny i obolochki. M.: Nauka, 1966. 635 s.
- [13] Rozin L.A. Sterzhnevyye sistemy kak sistemy konechnykh elementov. L.: Izd-vo LGU, 1976. 232 p.
- [14] Asheychik A.A., Polonskiy V.L. Raschet detaley mashin metodom konechnykh elementov. SPb.: Izd-vo SPbGPU, 2016. 243 p.
- [15] Roberts A.P., Garboczi E.J. Elastic properties of model random three-dimensional open-cell solids. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2002. Vol. 50(1). P. 33–55.
- [16] Roberts A., Garboczi E.J. Computation of the linear elastic properties of random porous materials with a wide variety of microstructure. Proceedings of the Royal Society. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2002. Vol. 458(2021). P. 1033–1054; ISSN 1364-5021; doi:10.1098/rspa.2001.
- [17] Charles P. Ursenbach Simulation of elastic moduli for porous materials. CREWES Research Report. 2001. Vol. 13. P. 83–98.
- [18] Shtern M.B., Kuzmov A.V., Frolova Ye.G., Vdovichenko A.V. Issledovaniye uprugogo povedeniya poroshkovykh materialov s ploskimi porami metodom pryamogo kompyuternogo modelirovaniya na elementarnoy yacheyke. Naukovi notatki Zbirnik naukovikh prats. 2005. No 17. pp. 390–398; UDK 621.762.
- [19] Garboczi E.J., Day A.R. An algorithm for computing the effective linear elastic properties of heterogeneous materials: 3D results for composites with equal phase Poisson ratios. Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1995. Vol. 43. Pp.1349–62.
- [20] Razina I.S., Semenova S. G., Sattarov A. G., Musin I. N. Primeneniye mikrotomografii dlya issledovaniya novykh materialov. Obzor. Vestnik Kazanskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta. Kazan: Izd-vo Kazanskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo universiteta; 2013. T. 16, vyp. 19. Pp. 163–169; UDK 620.1:622.23.05:62-408:678; ISSN 1998-7072.
- [21] Garboczi E.J. Bentz D.P., Martys N.S. Digital images and computer modeling in "Methods of the Physics of Porous Media". Ed. P.-z. Wong. San Diego: Academic Press, 1999. Vol. 35(1). P. 1–41.
- [22] Garboczi E.J. Finite element and finite difference programs for computing the linear electric and elastic properties of digital images of random materials [online] Sistem. trebovaniya: Adobe Acrobat Reader. URL: ftp://ftp.nist.gov/pub/bfrl/garbocz/DFEMANUAL/MANUAL.pdf (data obrashcheniya: 20.11.2016)
- [23] Levandovskiy A.N., Efremov A.M., Bruno G. Macro to micro stress and strain conversion in porous ceramics. Materials Science Forum. 2012. Vol. 706–709. P. 1667–672.
- [24] Emerson J.E., Matt J.C., Reilly G.C., Amaka C. Offiah Geometrically accurate 3D FE models from medical scans created to analyse the causes of sports injuries. Procedia Engineering. 2011. Vol. 13. P. 422–427.
- [25] Roshchin P.V., Rogachev M.K., Vaskes Kardenas L.K., Kuzmin M.I., Litvin V.T., Zinovyev A.M. Issledovaniye kernovogo materiala Pecherskogo mestorozhdeniya prirodnogo bituma s pomoshchyu rentgenovskogo kompyuternogo mikrotomografa SKYSCAN 1174V2. Mezhdunarodnyy nauchno-issledovatel'skiy zhurnal. 2013. No 8(15), chast 2. Pp. 45–48; ISSN 2303-9868.

- [26] Yiotis A.G., Kainourgiakis M.E., Eustathios S. Kikkinides, Stubos A.K. Application of the Lattice-Boltzmann method to the modeling of population blob dynamics in 2 D porous domains. Computers & Mathematics with Applications. April 2010. Vol. 59(7). P. 2315–2325.
- [27] Mo L.T., Huurman M., Wu S.P., Molenaar A.A.A. 2D and 3D meso-scale finite element models for ravelling analysis of porous asphalt concrete. Finite Elements in Analysis and Design. 2008. Vol. 44(4). P. 186–196; ISSN 0168-874X.
- [28] Gorshkov A.S., Vatin N.I. Svoystva stenovykh konstruksiy iz yacheistobetonnykh izdeliy avtoklavnogo tverdeniya na poliuretanomom kleyu [Properties of the wall structures made of autoclaved cellular concrete products on the polyurethane foam adhesive]. Magazine of Civil Engineering. 2013. No 5. Pp. 5–19 (rus).
- [29] Gorshkov A.S., Vatin N.I. Innovatsionnaya tekhnologiya vozvedeniya stenovykh konstruksiy iz gazobetonnykh blokov na poliuretannykh kley [The innovative technology for erection of all constructions of autoclaved aerated concrete blocks on polyurethane adhesive]. Construction of Unique Buildings and Structures. 2013. No 8. Pp. 20-28 (rus).
- [30] Nikitin A.N., Ivankina T.I., Sobolev G.A., Sheftsyuk K., Frishbutter A., Valter K. Neytronograficheskiye issledovaniya vnutrikristallicheskiy deformatsiy i napryazheniy v obraztse mramora pri povyshennykh temperaturakh i vneshnikh mekhanicheskikh nagruzkakh. Fizika Zemli. M.: Nauka, 2004. No 1. Pp. 88–92 (rus)
- [31] Frishbutter A, Neov D, Scheffzu"k C, Vrana M, Walther K. Lattice strain measurements on sandstones under load using neutron diffraction. Journal of Structural Geology. November 2000. Vol. 22(11–12). P. 1587–1600; ISSN 0191-814.
- [32] Darling T.W, TenCate J.A, Brown D.W., Clausen B., Vogel S.C. Neutron diffraction study of the contribution of grain contacts to nonlinear stress-strain behavior. Geophysical Research Letters. August 2004. Vol. 31(16/L16604). P. 1–4; doi:10.1029.
- [33] Bruno G., Efremov A.M., Levandovskiy A.N., Pozdnyakova I., Hughes D.J., Clausen B. Thermal and Mechanical Response of Industrial Porous Ceramics. Materials Science Forum. 2010. Vol. 652. P. 191–196; doi:10.4028.
- [34] Kouznetsova V.G. Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials: doctoral dissertation: 9.12.02. Kouznetsova Varvara. Eindhoven, 2002. 134 p.

*Левандовский А.Н., Мельников Б.Е., Шамкин А.А. Моделирование пористого материала методом конечных элементов, Строительство уникальных зданий и сооружений, 2017, №2 (53). С. 61-77.*

*Levandovskiy A.N., Melnikov B.E., Shamkin A.A. Porous material modeling with finite element method. Construction of Unique Buildings and Structures. 2017. 2(53). Pp. 61-77. (rus)*