# ARAFAZLI, HETEROJEN MİKROYAPININ ÇOK SEVİYELİ HOMOJENLEŞTİRME YAKLAŞIMI İLE MODELLENMESİ

Dilek Güzel<sup>1</sup> ve Ercan Gürses<sup>2</sup> Orta Doğu Teknik Üniversitesi - Havacılık ve Uzay Mühendisliği, Ankara

# ÖZET

Polimer nanokompozitler, takviye elemanının nano ölçekte olduğu, birleştirici matris materyalin ise polimer olduğu çok fazlı malzemelerdir. Polimer nanokompozit sisteminin genel performansını arttırmak adına matris ve takviye elemanının kendine ait özelliklerinin geliştirilmesi için çaba sarf edilmektedir. Performans optimizasyonu için bir diğer nokta ise bu iki fazın etkileşiminde ortaya çıkan arafaz ve arayüzeyi uygun hale getirmeye dayanır. Kompozitin etkin özelliklerinin belirlenmesi açısından arafazın modellenmesi bir gereklilik halini almıştır. Bu çalışmada arafaz, takviye elemanının çevresinde bulunan sabit özelliklere sahip bir kaplama bölgesi olarak modellenir. Ardından iki seviyeli bir homojenleştirme yaklaşımıyla etkin kompozit özellikleri belirlenir. İlk seviyede homojenleştirme tekniği olarak sonlu eleman yöntemi, ikinci seviye de ise mikromekanik tabanlı bir yaklaşım kullanılmaktadır. Önerilen yöntemin katılık değeri farklı arafazlar için sonuçları sonlu eleman yöntemi ve mikromekanik tabanlı Çift-Katkı modeliyle kıyaslanmıştır.

# GIRİŞ

Kompozit malzemelerin etkin özelliklerinin hesaplanmasında, kompozitin temel bileşenlerinin (matris ve takviye elemanı) mekanik özellikleri, parçacıkların topolojisi ve hacimsel oranları dikkate alınmaktadır. Matris ve takviye elemanının dışında, bu bileşenlerin arayüzünde bulunan üçüncü bir fazın varlığı uzun yıllardır kabul görmektedir. Bu bahsedilen bölgenin özellikleri kompozitin malzemenin performansını ciddi ölçüde etkilemektedir. Polimer matrisi ve takviye elemanı arasında zayıf veya güçlü arayüzey etkileşimlerinin kurulması kompozitin mekanik, ısıl ve elektrik iletkenliği gibi davranışlarını etkilediğinden dolayı kompozitin modellenmesi sırasında dikkate alınmalıdır. Arafaza ait bazı özellikler deneysel olarak veya moleküler dinamik ve benzeri simülasyon yöntemleriyle elde edilebilmektedir. Kompozit malzeminin makroskopik davranışının modellenmesi için arafazın genel yapısının ve özelliklerinin araştırılması bir gereklilik halini almıştır.

Arafazın modellenmesi ve arafaz özelliklerinin kompozitin makroskopik davranışına etkisinin incelenmesi adına literatürde bir çok farklı yaklaşım bulunmaktadır. Önerilen yöntem, arafazın,

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Araştırma görevlisi, Havacılık ve Uzay Müh. Böl., E-posta: dguzel@metu.edu.tr

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Doç. Dr., Havacılık ve Uzay Müh. Böl., E-posta: gurses@metu.edu.tr

takviye elemanının çevresinde bir kaplama bölgesi veya katman olarak değerlendirilmesi yaklaşımına dayanmaktadır. Çok fazlı kompozitlerin, etkin elastik modüllerinin tahmini için kullanılan bu yaklaşımda heterojen ortamın homojenleştirilmesi sırasında fazlar arasındaki etkileşimler dikkate alınmaktadır. Bu yaklaşımlar literatürde "kaplamalı takviye elemanı problemi" (coated inclusion problem) başlığı altında yer almaktadır, bu problem literatürde etraflıca tartışılmış, bir çok çözüm yöntemi ortaya atılmıştır [Buryachenko, 2007].

n-fazlı heterojen ortamın etkin mekanik özelliklerinin belirlenmesi hususunda, 1962 yılında Hashin tarafından Kompozit Küre Kümesi (Composite Sphere Assemblage) adı verilen bir model önerildi [Hashin, 1962]. Kompozit Küre Kümesi, Eshelby'nin 1957 yılında ortaya koyduğu analitik sonuçlara dayanmakta [Eshelby, 1957] ve küresel ve silindirik takviye elemanları için hacim ve kesme modüllerinin sınırlarını belirlemekte kullanılan bir yöntemdir. Walpole tarafından önerilen ince arafaz (thin interphase) vaklasımında ise arafaz, matris ve takviye elemanı arasında bulunan cok ince bir katman olarak kabul edilmektedir. Bu ortamın elastik özelliklerinin belirlenmesi sırasında bu arafazın olmadığı varsayılır ve arayüzey operatörleri kullanılarak, n-fazlı kompozitin gerilme dağılımı ve etkin elastik modülleri analitik olarak hesaplanır [Walpole, 1978]. Ardından, Mori-Tanaka tarafından geliştirilen "matristeki ortalama gerilme" kavramı kullanılarak [Mori and Tanaka, 1973] mikromekanik tabanlı bir yaklaşım Benveniste tarafından ortaya atılmıştır [Benveniste et al., 1989]. Bir diğer mikromekanik tabanlı yaklaşım, genelleştirilmiş kendinden tutarlı yöntem (generalized self consistent scheme-GSCS) olarak bilinir. Bu yöntemde heterojenliği oluşturan fazın etkin kompozit özelliklerine sahip bir ortama gömülü olduğu varsayılır [Hashin, 1990]. Döngülü (iterative) bir algoritma sayesinde kompozitin etkin termo-elastik özellikleri hesaplanabilmektedir. 1993 yılında, Hori ve Nemat-Nasser tarafından günümüzde iyi bilinen ve kabul edilen Çift-Katkı (Double-Inclusion) modeli sunulmuştur [Hori and Nemat-Nasser, 1994]. Bu raporda, bu model ayrıntılı olarak açıklanacaktır. Çift-katkılı model, anizotropik ortamdaki kaplanmıs elipsoit seklindeki takviye elemanlarının homojenlestirilmesi problemi ile ilgilidir. Diğer bir çok yöntemden farklı olarak, izotropi önkoşul olarak varsayılmamaktadır. Ancak bu yöntemde de problemin basitleştirilmesi adına kaplama bölgesi ve takviye elemanı içindeki gerilme dağılımının sabit olduğu varsayılmaktadır [Nemat-Nasser et al., 1996].

Kaplamalı takviye elemanı problemindeki bu öncü çalışmaları takiben, yıllar içinde bu alanda birçok araştırma yapılmıştır. Küresel veya silindirik simetriye sahip izotropik modeller için oluşturulan mikromekanik modellerin yanı sıra genel anizotropi durumu için Green fonksiyonları ve integral denklemlerine dayanan bir çok model geliştirilmiştir. Bu modellerin bazıları elastik modüllerin tahmininin yanı sıra, aynı zamanda problemin içindeki gerilim dağılımlarının çözümleri için de kullanılmaktadır.

2006'da Friebel, kaplamalı takviye elemanı probleminin genel çözümü için iki seviyeli ve iki adımlı homojenleştirme olmak üzere iki yeni teknik önerdi [Friebel et al., 2006]. İki seviyeli yaklaşım, matrisin, takviye elemanınını ve çevresindeki kaplama bölgesini bir kompozit yapı olarak görmesine dayanır. İlk seviyede, kaplamalı takviye elemanı, iki fazlı bir kompozit olarak muamele görür ve homojenleştirilir. İlk seviyenin sonunda yeni etkin takviye elemanı matrisin içine yerleştirilir, ardından ikinci seviyede matris ve etkin takviye elemanı homojenleştirilerek, etkin kompozit davranışı modellenebilir. Anlatılan iki seviyeli homojenleştirme yönteminin şematiği Şekil 1'de incelenebilir. Friebel tarafından önerilen ve birçok araştırmacı tarafından kabul gören diğer yöntem ise iki adımlı homojenleştirme yaklaşımıdır. Bu yaklaşımda, kaplama başka özelliklere sahip bir diğer takviye elemanı olarak değerlendirilir. Bu yaklaşım gerçek olmayan tanecik (pseudo-grain) kavramına dayanmaktadır, gerçek olmayan tanecikler, bir kompozitin içinde bulunan hayali bölgeler olarak düşünülebilir, bazı bölgelerde matris ve takviye elemanı, bazı bölgelerde ise matris ve kaplamanın var olduğu düşünülür, kaplama burada aynı takviye elemanı gibi muamele görür. Bu iki farklı hayali bölge kendi içinde homojenize edildikten sonra etkin modülün hesaplanması için kullanılır.



Şekil 1: Iki Seviyeli Homojenleştirme Yöntemi Gösterimi

Genellikle iki seviyeli homojenleştirme yöntemlerinde bir değiştirme/yenileme prosedürü vardır, takviye elemanı ve arafaz, çeşitli homojenleştirme yöntemleri kullanılarak etkili bir partikül olarak yeniden modellenir. Etkin takviye elemanı oluşturulduktan sonra ise herhangi bir homojenleştirme yöntemiyle, kompozitin makroskopik özellikleri belirlenebilir. Çok seviyeli homojenleştirme yaklaşımı bir çok farklı araştırmacı tarafından ortak bir uygulama yöntemi olarak kullanılmaktadır, [Duan et al., 2007], [Tran et al., 2015], [García-Macías et al., 2018]. Bu raporda önerilen yöntem de çok seviyeli bir homojenleştirme yaklaşımıdır. İlk seviyede takviye elemanı ve kaplama sonlu eleman analizi yöntemi ile homojenleştirilir, ardından etkin takviye elemanı ve matris ise mikromekaniğe dayalı olan Çift-Katkı modeliyle homojenleştirilip, kompozitin makroskopik davranışı modellenebilir.

### YÖNTEM

#### Mikromekanik Model

Uç fazlı kompozitlerin etkili modüllerinin tahmini için etkileşimleri ele alan farklı yaklaşımlar vardır, en iyi bilinen modeller arasında Kompozit Küre Kümesi (Composite Sphere Assemblage) [Hashin, 1962], n-fazlı model (n-phase model) [Hervé and Zaoui, 1995], Genelleştirilmiş Kendinden Tutarlı Yöntem (Generalized Self Consistent Scheme) [Christensen and Lo, 1979] ve Çift-Katkı (Double-Inclusion) sayılabilir [Hori and Nemat-Nasser, 1994]. Bu bildiride önerilen çok seviyeli homojenleştirme yaklaşımında, ikinci seviyede Çift-Katkı yöntemi kullanılmaktadır. Aynı zamanda önerilen yöntemin avantajlarının açıklanması adına kıyaslama amacıyla bu modelden yararlanılmaktadır.

Kaplamalı takviye elemanı probleminin 2 boyutta gösterimi Şekil 2'de verilmektedir. Şekilde görüldüğü gibi, üç faz bulunmaktadır, sırasıyla f, m ve l ile özellikleri gösterilen bölgeler, takviye elemanı, matris ve arafaza karşılık gelmektedir. Gösterilen bölgelerin elastisite tensörleri bu bölgeler içinde sabit kabul edilmektedir. Elastisite tensörünü kalınlıktan veya yarıçaptan uzaklaşırken fonksiyonel olarak modellemenin mümkün olmasına rağmen [Li, 2000] burada basitleştirici bir varsayım tercih edilmektedir. Aynı zamanda fazların davranışını anizotropik olarak modellemek mümkün olmasına rağmen, basitleştirme amacıyla izotropik elastik davranış varsayılmaktadır. Tablo 1'de, fazların Young modülü ve Poisson oranı verilmektedir.



Şekil 2: Kaplamalı Takviye Elemanı Probleminin Iki Boyutlu Gösterimi

Faz	Young modülü $(E)$ [GPa]	Poisson orani $(\nu)[-]$
Matris	2.5	0.34
Yumuşak Arafaz	0.25	0.30
Sert Arafaz	25.0	0.30
Takviye Elemanı	1000	0.30

Tablo 1: Kompozit Sisteminin Elastisite Özellikleri

Hori ve Nemat-Nasser'in önerdiği mikromekanik modelde takviyelerin elipsoit şeklinde ve eş eksenli olduğu varsayılmaktadır. Model, takviyelerin doğrusal elastik malzeme davranışına sahip olduğunu ve benzer şekillerde olduğunu varsayar. Çok fazlı kompozitin elastisite tensörü Çift-Katkı modelinde  $(\mathbb{C})$  aşağıdaki denklemde verildiği şekilde hesaplanabilir.

$$\mathbb{C} = \mathbb{C}^{inf} [\mathbb{I} + (\mathbb{S} - \mathbb{I})\Lambda] [\mathbb{I} + \mathbb{S}\Lambda]^{-1}$$
(1)

Burada  $\mathbb{C}^{inf}$  hayali bir sonsuz bölgenin elastisite tensörünü,  $\mathbb{I}$  dördüncü dereceden birim tensörü,  $\mathbb{S}$  elipsoit takviye elemanı için hesaplanması gereken Eshelby tensörünü ifade eder. Bu sonsuz bölgenin kompoziti kapsadığı varsayılır ve modelin düzgün çalışması adına gerekli bir varsayımdır. Sonsuz bölgenin elastik özellikleri, kompozitin özelliklerine eşit oluncaya kadar yinelemeli bir yöntem ile belirlenir.  $\Lambda$  ise her faz (n) için ayrı ayrı değerlendirilmeli ve hesaplanmalıdır. Belirlenen bölgenin içinde sabit olarak kabul edilen elastisite tensörü için  $\Lambda$  aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\Lambda = \sum_{i=1}^{n} f_i \Lambda_i \tag{2}$$

$$\Lambda_i = [(\mathbb{C}^{inf} - \mathbb{C}_i)^{-1} \mathbb{C}^{inf} - \mathbb{S}]^{-1}$$
(3)

Denklem 2'de,  $f_i$ , *i*-fazının hacim oranını ifade eder.  $\mathbb{S}$ , elipsoit takviye elemanı için hesaplanacak Eshelby tensörü, takviye elemanının küre olduğu durumda izotropiden dolayı sadeleşir.

Çift-Katkı modelinde, arafaz bölgesi, takviye elemanının çevresinde ayrı bir faz olarak modellenir, bu iki fazın arasındaki etkileşimin modelde görülmesi beklenir. Ancak özel bir durum olan, takviye elemanı ve kaplama (arafaz) bölgesinin en-boy oranının eşit olduğu durumda, Çift-Katkı modeli literatürde sıkça kullanılan Mori-Tanaka modeline eşdeğerdir. Mori-Tanaka çözümünde ise iki faz arasındaki etkileşim dikkate alınmaz. Bu sonuç, Çift-Katkı modelinde arafazın takviye elemanı çevresinde bir kaplama bölgesi olarak görülmediğini, ancak arafaz özelliklerine sahip farklı bir takviye fazı olarak görüldüğünü ima eder [Wang et al., 2016]. Çift-Katkı modelinde, kaplamalar matristeki ayrı bir fazmış gibi davranırlar, bu sonuç Mori-Tanaka modelinin ikiden fazla faz için geliştirildiği duruma denktir, Şekil 3'te bu iki durumun kıyaslaması şematik olarak gösterilmektedir.



Şekil 3: Solda Çift-Katkı ve Sağda Mori-Tanaka Modellerinin Gösterim Kıyaslaması

#### Sonlu Eleman Yöntemi ile Homojenleştirme Yöntemi

Kompozit malzemenin elastik özelliklerini belirlemek için homojenleştirilmiş gerilme tensörü ve gerinim tensörü kullanılılabilir. Homojenleştirilmiş gerilme tensörü  $\sigma^{eff}$ , homojenleştirilmiş gerinim tensörü  $\epsilon^{eff}$  ve temsili hacim elemanının (THE) elastisite tensörü  $\mathbb{C}$  kullanılarak aşağıdaki şekilde hesaplanır

$$\boldsymbol{\sigma}^{eff} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\epsilon}^{eff} \tag{4}$$

Homojenleştirilmiş gerilme ve gerinim tensörlerinin bilinmesi durumunda, etkin elastisite tensörü elde edilebilmektedir. 3 boyutlu, izotropik bir temsili hacim elemanı için, elastik gerilme-gerinim ilişkisi Voigt gösterimiyle, aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{55} & 0 \\ sym & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{12} \\ 2\epsilon_{23} \\ 2\epsilon_{13} \end{bmatrix}$$
(5)

Izotropik elastisite durumu için  $\mathbb{C}$  tensörü sıfırdan farklı 9 bileşene (2 bağımsız elastik sabite bağlı olmak üzere) sahiptir, bu durumda 9 sabit için 9 denkleme ihtiyaç duyulmaktadır. Gerinim kontrollü sonlu eleman analizleri yapılarak makroskopik gerilme tensörleri hesaplanır. Voigt gösterimindeki elastisite matrisinin her bir sütunun belirlenmesi için gerinim tensörünün sadece bir elemanının 0'dan farklı bir değer alması sağlanır. Aşağıda verilen altı yük durumu test edilerek, elastisite tensörü elde edilebilir, bu tensörlerde *a* seçilen, sabit bir yükleme parametresidir.

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \end{bmatrix} \quad , \begin{bmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \begin{bmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Bu durumda, ilk yükleme ile  $\mathbb{C}_{11}$ ,  $\mathbb{C}_{12}$ ,  $\mathbb{C}_{13}$  değerleri elde edilir. İkinci yükleme,  $\mathbb{C}_{21}$ ,  $\mathbb{C}_{22}$ ,  $\mathbb{C}_{23}$  değerlerini verir, üçüncü olarak ise  $\mathbb{C}_{31}$ ,  $\mathbb{C}_{32}$ ,  $\mathbb{C}_{33}$  değerleri elde edilir. Basit kesme yüklemeleri için sonuçlar sırasıyla,  $\mathbb{C}_{44}$ ,  $\mathbb{C}_{55}$  ve  $\mathbb{C}_{66}$  değerlerini verir. Bu çalışma boyunca izotropi önköşul olarak verilmemiş, aksine sonuçlar doğrultusunda gözlemlenmiştir.

Onerilen yöntem için küre şeklinde bir temsili hacim elemanı kullanılmaktadır. Küre şeklindeki bu temsili hacim elemanına doğrusal yer değiştirme sınır koşulları uygulanmıştır. Denklem 6'daki yükleme koşullarına karşılık gelen deforme olmuş temsili hacim elemanları Şekil 5'te sunulmuştur. Denklem 6'da verilen ilk üç yükleme tek eksenli çekme yüklemesine, ardından gelen üç yükleme ise basit kesme yüklemesine karşılık gelmektedir. Bu çalışma boyunca kullanılan temsili hacim elemanı ve Abaqus ortamında oluşturulan, sonlu eleman analizinde kullanılan ağ yapısı Şekil 4'te sunulmuştur. Sonlu eleman yönteminde kullanılan eleman tipi (C3D8) 3 boyutlu, 8 düğüm noktalı doğrusal elemanlardır.



Şekil 4: Solda 3-Fazlı Model İçin Küresel Hacim Elemanı Gösterimi, Sağda Küresel Hacim Elemanının Çözüm Ağı Gösterimi

Şekil 5a'da küresel hacim elemanının x yönünde tek-eksenli düzgün çekme yüklemesi altında deforme olmuş şekli görülmektedir. Şekil 5a x - y düzleminde, yer değiştirmenin büyüklüğünü göstermektedir. Temsili hacim elemanı, y ve z yönünde çekilerek, Denklem 6'da gösterilen ikinci ve üçüncü yüklemeler elde edilebilir. Şekil 5b'de küresel hacim elemanının x - y düzleminde, basit kesme yüklemesi altında deforme olmuş şekli görülmektedir. Bu yükleme, Denklem 6'da gösterilen dördüncü yüklemeye karşılık gelmektedir. Şekil 5b'de x - y düzleminde, yer değiştirmenin büyüklüğünü göstermektedir. Bu çalışma boyunca, sonlu eleman analizleri Abaqus ile gerçekleştirilmiştir.



Şekil 5: Solda Küresel Hacim Elemanı İçin Düzgün Çekme Yüklemesi, Sağda Küresel Hacim Elemanı İçin Basit Kesme Yüklemesi

Tablo 1 incelendiğinde, arafazın matristen yumuşak ve sert olduğu durumlar için iki farklı elastisite modülü verildiği, Poisson oranının ise sabit kabul edildiği görülebilir. Arafazın bu iki durumu için etkin elastisite modülleri iki farklı yöntemle hesaplanmıştır. Mikromekanik yönteme dayanan Çift-Katkı metodu ve sonlu eleman yöntemi kıyaslama amacıyla verilmektedir.



Şekil 6: Elastik Sabitlerin E,  $\kappa$ , Sert ve Yumuşak Arafaz Durumları İçin, Mikromekanik Çift-Katkı (D-I) Modeli ve Sonlu Eleman Yöntemi (FEA) Kıyaslama Sonuçları

Şekil 6 incelendiğinde görüleceği gibi, mikromekanik Çift-Katkı modeli (D-I model), arafaz sert olduğunda etkin modülü son derece iyi tahmin etmektedir, ancak arafazın yumuşak olduğu durumda, sonlu eleman yönteminden hesaplanan (burada referans çözüm olarak kabul edilen) sonuçlar arasında ciddi bir fark gözlemlenmektedir. Çift-Katkı modelinin, arafazın takviye elemanınında daha sert olduğunda oldukça iyi sonuçlar vermesi beklenmektedir. Bu sonuç sonlu eleman yöntemiyle de kıyaslandığında beklenilen davranış gözlemlenmiştir. Bununla birlikte, arafazın takviye elemanına kıyasla daha yumuşak olduğu durumlarda, takviye elemanı çevresindeki kaplamanın yumuşak olmasından kaynaklanan yük transferi etkilerinin tahmin edilememesinden dolayı Çift-Katkı modelinin yanlış sonuçlar vermesi beklenmektedir.

Bu nedenle, bu bildiride iki seviyeli bir homojenleştirme yöntemi önerilmektedir. Iki seviyeli homojenleştirme yönteminin ilk seviyesinde temel amaç, takviye elemanı ile arafazı homojenleştirmektir. Bu çalışmada, sonlu eleman simülasyonları yoluyla etkin bir takviye elemanı elde edilmektedir. Etkin takviye elemanının elastisite tensörünü elde etmek adına altı yük durumu için sonlu eleman analizleri yapılmaktadır. Geometrinin simetrisinin ve fazların izotropik olmasının sonucu olarak, makroskopik olarak izotropik bir elastisite tensörü elde edilir.

Etkin elastisite tensörünün hesaplanmasının ardından elastik sabitler (Young modülü, kesme modülü, hacim modülü, Poisson oranı) türetilebilir. Elastik sabitler alındıktan sonra, sonuçta elde edilen izotropik etkin takviye elemanı, Çift-Katkı modelindeki homojen takviye elemanı olarak kabul edilmelidir. Karşılaştırma amacıyla, üç fazlı sonlu eleman modelleri oluşturulmuş ve aynı prosedürü uygulayarak benzer şekilde üç fazlı model için de elastik sabitler türetilmiştir.

Sonlu eleman analizlerindeki toplam eleman sayısının belirlenmesi adına çözüm ağı hassasiyet analizi yapılmıştır. Modellerin tutarlı olması için farklı hacimsel orana karşılık gelen modellerde arafaz kalınlığı hassasiyet analizinin sonunda seçilen değere bölünmektedir. Bu sayede farklı hacimsel orana karşılık gelen her model benzer sonlu eleman ağına sahiptir.



Şekil 7: Elde Edilen Kompozitin Elastisite Tensörünün Farklı Elemanlarının Duyarlılık Analizi Sonucu,  $\phi_{takviye elemani} = 0.01$ , Kalınlık = t Durumu

Şekil 7'de gözlemlenebileceği gibi, duyarlılık analizi etkin elastisite tensörünün farklı elemanları için yapılmıştır. Farklı eleman sayılarına karşılık gelen elastisite değerleri birbirine çok yakın olduğundan dolayı, işlem gücü ve süresi değerlendirilerek arafazın 20 elemana bölündüğü durum seçilmiştir. Bu durumda toplamda modelde 80000 eleman vardır.

#### UYGULAMALAR

#### Sabit Arafaz Kalınlığı İçin Arafazın Mukavemetinin Etkisi

Kaplamalı takviye elemanı problemi için üç çözüm yöntemi çalışmanın bu bölümünde karşılaştırılmaktadır, tamamen sonlu eleman yöntemiyle elde edilen 3-fazlı model (referans çözüm olarak kabul edilecektir), Çift-Katkı modeliyle elde edilen 3-fazlı model ve iki seviyeli (ilk seviyesinde sonlu eleman yöntemi kullanılan) homojenleştirme yöntemiyle elde edilen 3-fazlı model olmak üzere. Arafaz kalınlığı sabit olarak kabul edilmiş, ancak arafazın mukavemet değerleri yumuşak ve sert olarak iki farklı değer seçilmiştir. Yumuşak arafaz için, matris elastik modülünün onda biri, sert arafaz için ise matris elastik modülünün on katı seçilmiştir. Analizlerde kullanılan malzeme sabitleri Tablo 1'de görülmektedir. Referans kalınlık olarak belirlenen *t*, hacim oranı yüzde 1 olan durumda arafaz kalınlığının takviye elemanı yarıçapının yüzde 60'ı olduğu varsayılarak seçilmiştir.

Beklenildiği gibi sert arafaz durumu için mikro-mekanik model ile sonlu eleman yöntemi ile elde edilen sonuçlar uyumludur. Ancak iki seviyeli homojenleştirme sonuçları ile sonlu eleman yöntemi sonuçları özellikle Young modülü için daha iyi uyum göstermektedir. Sonuç olarak seyreltilmiş sınır (dilute limit) içinde kalındığı sürece, her iki yöntem de hem birbirleriyle benzer, hem de referans olarak kabul edilen sonlu eleman yöntemi sonuçlarıyla benzer karakter gösterir.



Şekil 8: Elastik Sabitler E,  $\kappa$ , Çift-Katkı Modeli, Sonlu Eleman Modeli Sonuçları ve Önerilen Yöntemin Sert Arafaz İçin Kıyaslanması, Kalınlık = t Durumu

Şekil 8 ve Şekil 9'de yumuşak ve sert arafaz durumu kıyaslandığında, mikromekanik sonuçlar ve sonlu eleman yöntemi sonuçları önemli ölçüde yumuşak arafaz durumu için fark edip ayrı sonuçlar verirken, sert arafaz modelleri için oldukça benzer sonuçlar vermektedir. Bu durum "stress shielding" fenomenine atfedilebilir, takviye elemanı ve polimer matrisi arasındaki stres transferi yumuşak arafaz yüzünden engellenmektedir, Mori-Tanaka yöntemindeki arafaz ayrı bir faz olarak ele alındığında, Mori-Tanaka yöntemi arafazın doğasını doğru bir şekilde efektif modülün tahmin edilmesinde dikkate alamaz. Çift-Katkı yönteminde, takviye elemanı ve arafaz bölgesinin en-boy oranının aynı olduğu durumda modelin Mori-Tanaka modeline karşılık geldiği önceden açıklanmıştır. Bu sonuç doğrultusunda yumuşak arafaz durumu için özellikle bir homojenleştirme yaklaşımına ihtiyaç duyulmaktadır. Bu raporda önerilen çok seviyeli homojenleştirme yaklaşımı bu ihtiyacı giderecek bir yöntemdir. Şekil 8 ve Şekil 9 kıyaslandığında çok seviyeli homojenleştirme yaklaşımının yumuşak arafaz vakası için etkili bir yöntem olduğu görülmektedir.



Şekil 9: Elastik Sabitler E,  $\kappa$ , Çift-Katkı Modeli, Sonlu Eleman Modeli Sonuçları ve Önerilen Yöntemin Yumuşak Arafaz İçin Kıyaslanması, Kalınlık = t Durumu

Mikromekanik model (Çift-Katkı modeli), arafazın yumuşak olduğu durumda karakteristik olarak, referans kabul edilen sonlu eleman analizi sonuçlarından farklı sonuçlar vermektedir. Diğer yandan bu raporda önerilen iki seviyeli homojenleştirme ile bu durum ortadan kaldırılmaktadır.

İki seviyeli homojenleştirme yönteminde ikinci seviyede Çift-Katkı modeli kullanılmıştır, bu seviyede farklı mikromekanik yöntemlerin kullanılması da mümkündür. Bir kompozitin elastik özelliklerinin

belirlenmesi için, Reuss [Reuss, 1929] ve Voigt [Voigt, 1928] modelleri sabit gerilme ve sabit gerinim durumlarına karşılık gelir ve kompozitin ulaşılabilir toplam sertliği için alt ve üst sınırları belirler. Şekil 10'de homojenleştirmenin ikinci seviyesinde önerilen Çift-Katkı modelinin haricinde, Reuss ve Voigt sınırlarının kullanıldığı durum gösterilmektedir. Beklendiği gibi Voigt sınırı bir üst sınır, Reuss sınırı ise bir alt sınır oluşturmuştur, yumuşak ve sert arafaz durumları için.



Şekil 10: Elastik Sabit E, Sonlu Eleman Modeli Sonuçları ve İki Seviyeli Homojenleştirme Yönteminde Farklı Mikromekanik Yöntemlerin, Solda Sert Arafaz, Sağda Yumuşak Arafaz İçin Kıyaslanması, Kalınlık = t Durumu

#### Seyreltilmiş Limitin (Dilute Limit) İhlali

Bu çalışma kapsamında genellikle, arafaz ve takviye elemanının toplam hacimsel oranının seyreltilmiş limitin altında kalmasına rağmen, seyreltilmiş limitin ihlali durumunda elde edilecek sonuçlara da bakılmak istenmiştir. Genellikle bu limit %5'in altında kabul edilmektedir [Ordonez-Miranda and Alvarado-Gil, 2012], bu durumun incelenmesi adına arafaz ve takviye elemanının hacimsel oranının %30 gibi oldukça yüksek bir orana çıkmasına izin verilmiştir.

Mikromekanik model için seyreltilmiş limitin üstünde, sonuçlar doğru kabul edilemez. Belirli bir hacim oranından sonra, arafaz takviye elemanından daha yumuşak yapıda olmasına rağmen, etkin kompozit modülü artmaya başlar. Ancak önerilen iki seviyeli homojenizasyon yöntemi bu karakteri göstermez, sürekli olarak düşmeye devam eder ve seyreltilmiş limitin üstünde bile oldukça yakın sonuçlar verir. Bu sonuçların gösterimi için yumuşak arafaz kullanılmış, kalınlık ise t olarak seçilmiştir. Şekil 11'da görüldüğü gibi, önerilen yöntemle referans çözüm olan sonlu elemanlar analizine çok yakın sonuçlar elde edilebilmiştir.



Şekil 11: Elastik Sabitler E,  $\kappa$ , Yumuşak Arafaz Sonuçları İçin, Seyreltilmiş Limitin Üstündeki Hacimsel Oranlar İçin, Kalınlık = t Durumu

#### SONUÇ

Tamamen sonlu eleman yöntemiyle elde edilen 3-fazlı model (referans çözüm olarak kabul edilmiştir), Çift-Katkı modeliyle elde edilen 3-fazlı model ve iki seviyeli (ilk seviyesinde sonlu eleman yöntemi kullanılan) homojenleştirme yöntemiyle elde edilen 3-fazlı model, arafazın yumuşak ve sert olduğu durumlar için elde edilmiş ve sonuçlar kıyaslanmıştır. Aynı zamanda bu üç model, mikromekanik tabanlı modellerde bir kısıtlama olan seyreltilmiş limitin ihlali durumunda incelenmiştir. Önerilen yöntem arafazın yumuşak olduğu durumlarda önem kazanmaktadır. Takviye elemanı ve arafazın topolojisi nedeniyle ortaya çıkan stres transferi problemi mikromekanik tabanlı homojenleştirme yöntemleri tarafından çözülememektedir. Önerilen yöntemin iki seviyeli bir homojenleştirme yaklaşımıyla bu problemin üstesinden gelebildiği gösterilmiştir.

#### Teşekkür

Bu çalışma "218M274" kodlu "Polimer Nanokompozit Malzemelerin Mekanik Davranışının Modellenmesi için Bileşik Sonlu ElemanSınır Elemanı Yönteminin Geliştirilmesi" adlı TÜBİTAK-1001 projesi tarafından desteklenmektedir.

# Kaynaklar

- Benveniste, Y., Dvorak, G. J., and Chen, T. (1989). Stress fields in composites with coated inclusions. *Mechanics of Materials*, 7:305–317.
- Buryachenko, V. (2007). *Micromechanics of Heterogeneous Materials*. Springer Publishing Company, Incorporated, 1st edition.
- Christensen, R. and Lo, K. (1979). Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 27(4):315 330.
- Duan, H., Yi, X., Huang, Z. P., and Wang, J. (2007). A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. part i: Theoretical framework. *Mechanics of Materials*, 39:81–93.

- Eshelby, J. D. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 241(1226):376–396.
- Friebel, C., Doghri, I., and Legat, V. (2006). General mean-field homogenization schemes for viscoelastic composites containing multiple phases of coated inclusions. *International Journal* of Solids and Structures, 43(9):2513 – 2541.
- García-Macías, E., Castro-Triguero, R., Sáez, A., and Ubertini, F. (2018). 3d mixed micromechanics-fem modeling of piezoresistive carbon nanotube smart concrete. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 340.
- Hashin, Z. (1962). The Elastic Moduli of Heterogeneous Materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29(1):143–150.
- Hashin, Z. (1990). Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface. *Mechanics of Materials*, 8:333–348.
- Hervé, E. and Zaoui, A. (1995). Elastic behaviour of multiply coated fibre-reinforced composites. International Journal of Engineering Science, 33:1419–1433.
- Hori, M. and Nemat-Nasser, S. (1994). Double-Inclusion Model and Overall Moduli of Multi-Phase Composites. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 116(3):305–309.
- Li, J. Y. (2000). Thermoelastic behavior of composites with functionally graded interphase: a multi-inclusion model. *International Journal of Solids and Structures*, 37(39):5579 5597.
- Mori, T. and Tanaka, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5):571 574.
- Nemat-Nasser, S., Lori, M., and Datta, S. K. (1996). Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials. *Journal of Applied Mechanics*, 63(2):561–561.
- Ordonez-Miranda, J. and Alvarado-Gil, J. (2012). Thermal conductivity of nanocomposites with high volume fractions of particles. *Composites Science and Technology*, 72:853–857.
- Reuss, A. (1929). Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle . ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 9(1):49–58.
- Tran, B. V., Pham, D. C., and Nguyen, T. H. G. (2015). Equivalent-inclusion approach and effective medium approximations for elastic moduli of compound-inclusion composites. *Archive of Applied Mechanics*, 85(12):1983–1995.
- Voigt, W. (1928). Lehrbuch der kristallphysik, volume 962. Teubner Leipzig.
- Walpole, L. J. (1978). A coated inclusion in an elastic medium. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 83(3):495–506.
- Wang, Z., Oelkers, R., Lee, K., and Fisher, F. (2016). Annular coated inclusion model and applications for polymer nanocomposites – part i: Spherical inclusions. *Mechanics of Materials*, 101:170–184.