NANOKOMPOZİT MALZEMELERİN ELASTİK ÖZELLİKLERİNİN GÖMÜLÜ ELEMAN YÖNTEMİ İLE HESAPLANMASI

A.Elif Altay¹ ODTÜ – Havacılık ve Uzay Müh., Ankara

Ercan Gürses² ODTÜ – Havacılık ve Uzay Müh., Ankara

ÖZET

Bu çalışmada, karbon nanotüp ile güçlendirilmiş kompozit malzemelerin elastik özellikleri gomülü eleman yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Nano-takviye ve matristen oluşan heterojen temsili hacim elemanı gömülü eleman yöntemiyle homojenleştirilmiş ve nanokompozitin elastisite tensörü elde edilmiştir. Normal bir sonlu eleman analizine göre ağ örgüsünün daha kolay kurulabildiği gömülü eleman yönteminin sonuçları geleneksel sonlu elemanlar yöntemiyle elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Ağ örgüsünün sıklığının analiz sonuçlarını ne şekilde etkilediği incelenmiştir. Modelleme ve sonlu eleman analizleri Abaqus sonlu elemanlar yazılımı kullanılarak yapılmıştır.

GIRİŞ

Kompozit malzemeler hafiflikleri, yorulmaya karşı yüksek dirençleri ve mekanik özelliklerinin kullanılacak yere uygun olarak değiştirilebilmeleri nedeniyle sıkça tercih edilmektedir. Kompozit malzemeler matris içerisine gömülmüş sürekli veya kırpılmış takviye malzemelerden oluşmaktadır. Kompozit malzemeyi oluşturan matris ve takviyeler, kompozitin mekanik özelliklerini belirleven temel etkenlerdendir. Bu çalışmada, elastik modülü diğer takviye malzemelerine oranla çok daha yüksek olan (0.1 TPa'dan 1.7 TPa'ya kadar değişebilen) karbon nanotüpler takviye malzemesi olarak seçilmiştir [Krishnan ve ark..,1998; Poncharal ve ark., 1999]. Karbon nanotüpler kırpılmış takviye malzemesi olarak matris içine gömülmektedir. Kırpılmış takviye malzemesi içeren kompozit malzemelerin sonlu eleman analizinde, çok fazla sayıda küçük ölçekli kırpılmış takviye malzemesinin bulunmasından ötürü, geleneksel yöntem ile yapılan analizlerden farklı olarak temsili hacim elemanı kullanılmaktadır. Bu analizler yapılırken her bir karbon nanotüpün modellenmesi, ağ örgüsünün kurulması ve çözüme ulaşılması zaman almaktadır. Matris içerisinde kırpılmış halde bulunan takviye malzemelerin sonlu eleman analizini daha verimli hale getirebilemek adına çeşitli araştırmalar yapılmıştır [Liu, Zeng, Li, Jiang, 2016]. Bu analizleri kolaylaştırabilmek adına gömülü eleman yöntemi geliştirilmiştir. Verimlilik ve doğru çözümleme derecesini görmek adına gömülü eleman yöntemi ile elde edilen sonuçlar, geleneksel sonlu eleman yöntemi ile yapılan sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Makroskopik seviyedeki mekanik özellikleri elde etmek adına, temsili hacim elemanı gömülü eleman yöntemi ile homojenleştirilerek elastisite tensörü hesaplanmıştır.

¹Y.Lisans Öğrencisi & Yapısal Analiz Mühendisi, E-posta: e174672@metu.edu.tr

² Doç. Dr. ODTÜ Havacılık ve Uzay Müh. Böl., E-posta: gurses@metu.edu.tr

YÖNTEM

Temsili Hacim Elemanı

Temsili hacim elemanı, bir bütünden alınan ve o bütünün mekanik özelliklerini aynı şekilde yansıtan en küçük elemandır. Tüm hacmin analiz edilip sonuç alınması yerine, temsili hacim elemanı kullanılarak malzemenin mekanik özellikleri elde edilebilir. Karbon nanotüpler kompozit malzeme içerisinde kırpılmış olarak bulunmaktadır. Yarattığı heterojenlik nedeniyle modellemesi ve çözüm süreci zor olmaktadır. Şekil 1'de temsili hacim elemanı şematize edilmiştir [Srivasta ve Kumar, 2018].



Şekil 1: Temsili Hacim Elemanı [Srivasta ve Kumar, 2018]

Gömülü Eleman Tekniği

Gömülü eleman tekniği, seçili bir grup elemanın (gömülü eleman) temel elemanlar içerisine gömülmesiyle oluşturulan ağ örgüsü modelidir. Bu teknik, gömülü eleman bölgelerinin ve diğer bölgelerin ağ örgüsünün ayrı ayrı modellenebilmesine olanak sağlar. Diğer bir deyişle gömülü eleman ve temel elemanların düğüm noktalarının kesişme zorunluluğu yoktur. Abaqus programı, gömülü eleman ve temel elemanların düğüm noktaları arasında geometrik ilişkiler arar. Eğer gömülü elemanın düğüm noktası temel eleman içerisinde yer alıyorsa, gömülü elemanın düğüm noktası şekil fonksiyonlarıyla temel elemanın düğüm noktaları ile ilişkilendirilir [Abaqus Guide].

Bu yöntem uygulanırken, aynı bölgede hem gömülü eleman hem de temel eleman tanımlanmış olur. Bu yüzden hesaplamalarda Abaqus her iki malzemenin de rijitliğini hesaba katar ve bu durum yapının olduğundan daha katı davranmasına neden olur. Aynı bölgede hem gömülü eleman, hem de temel elemanın katılığının hesaba katılmaması adına, gömülü elemanın mekanik özellikleri tanımlanırken gömülü elemanın elastisite modülünden, temel elemanın elastisite modül değeri çıkarılmalıdır.

Temsili Hacim Elemanının Homojenize Edilmesi

Bu çalışmada temsili hacim elemanlarının oluşturulmasında, hem konvansiyonel sonlu eleman analizlerinde hem de gömülü sonlu eleman analizlerinde Abaqus yazılımı kullanılmıştır. Ağ örgüsünün sıklığının gömülü eleman modeli üzerindeki etkilerine bakmak için fiber yönünde deplasman verilip karşılık gelen tepki kuvvetleri karşılaştırılmıştır.

Her ne kadar temsili hacim elemanı tüm hacmi temsil ediyor olsa da, karbon nanotüpler kırpılmış halde matris içerisinde bulunduğu için heterojen bir yapı sergilemektedir. Bu yapıdan gelen sonuçları homojenize etmek için, her bir elemanın etkisi ağırlık fonksiyonu mantığı ile hesaplanmıştır. Bu hesaplamalarda, gömülü eleman yöntemiyle bulunan sonuçların konvansiyonel sonlu eleman yöntemiyle yapılan analiz sonuçlarıyla kıyaslaması yapılmıştır. Her bir elemanın gerilme değeri, elemanın integrasyon noktasındaki hacim değeri ile çarpılarak makroskopik gerilme aşağıdaki şekilde hesaplanmıştır.

$$\overline{\sigma} = \frac{\sum_{i=1}^{n} V_i \cdot \sigma_i}{\sum_{i=1}^{n} V_i}$$

σ: Homojenleştirilmiş gerilme tensörü

σ_i : Integrasyon noktasındaki gerilme tensörü

V_i: Integrasyon noktasının hacmi

Elastisite tensörünün tanımlanması için gerekli olan 6 farklı yükleme tanımlanmıştır ve her bir yükleme sonucunda homojenleştirilmiş gerilme tensörü bulunmuştur. Bu altı yüklemenin ilk üçü farklı yönlerde tek eksenli uzama şekil değiştirmesine, son üçü ise üç farklı düzlemde basit kesme şekil değiştirmesine karşılık gelmektedir. Sonrasında gerilme ile gerinim arasındaki doğrusal ilişki yardımıyla her bir yüklemenin sonucunda elastisite tensörünün bir kolonundaki sabitler hesaplanarak, elastisite tensörü oluşturulmuştur.

Ortotropik malzemeler için elastisite tensörü aşağıdaki gibidir:

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

X yönündeki uzamadan tensörün ilk sütunundaki C₁₁, C₁₂, C₁₃; Y yönünden tensörün ikinci sütunundaki C₁₂, C₂₂, C₂₃; Z yönünden ise tensörün üçüncü sütunundaki C₁₃, C₂₃, C₃₃ değerleri bulunmuştur. Aynı şekilde kesme gerinimi verilerek tensörün dördüncü, beşinci ve altıncı sütunlarındaki C₄₄, C₅₅ ve C₆₆ değerleri sırasıyla elde edilmiştir.

Örnek verecek olursak; doğrusal gerilme-gerinim ilişkisini($\sigma = C \varepsilon$) açtığımız zaman X yönündeki uzama için sınır koşulları $\varepsilon_{11} \neq 0$ ve gerinim tensörünün diğer bileşenleri sıfır olacak şekilde tanımlanmıştır. ($\varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{14} = \varepsilon_{15} = \varepsilon_{16} = 0$)

$$\sigma_{11} = C_{11} \varepsilon_{11} + C_{12} \varepsilon_{22} + C_{13} \varepsilon_{33} + C_{14} \varepsilon_{12} + C_{15} \varepsilon_{23} + C_{16} \varepsilon_{13}$$
(3)

Homojenize gerilme tensörü sonlu eleman analizi sonunda hesaplandığından ve homojenize gerinim tensörü sınır koşulları ile tanımlandığından, $\sigma_{11} = C_{11} \epsilon_{11}$ denkleminden C_{11} değeri bulunmuştur. Aynı işlemler diğer elastisite tensör bileşenlerini bulmak için de gerçekleştirilmiştir. Örneğin C₄₄ değerini bulmak için sadece $\epsilon_{12} \neq 0$ sınır koşulu tanımlanmış, gerinim tensörünün diğer bileşenleri sıfır alınmıştır.

Abaqus programı Python altyapısıyla doğrudan çalışabildiği için, bu işlemler Abaqus sonuçlarından gelen değerler kullanılarak Python kodundan elde edilmiştir.

UYGULAMALAR

Ağ Örgüsü Sıklığı

Ağ örgüsünün sıklığının sonuçlara etkisini görmek adına 3 farklı boyuttaki ağ örgüsü, hem normal modelde, hem de gömülü modelde hazırlanmıştır. Fiber yönünde deplasman verilmiş ve sonuçlar konvansiyonel sonlu elemanlar yöntemi ile karşılaştırılmıştır. Şekil 2'de karbon nanotüp ve matris modellemesi gösterilmiştir. Farklı boyutlardaki sonlu eleman ağı görselleri ise Şekil 3'te ve Şekil 4'te gösterilmiştir.

(1)







Şekil 3: Geleneksel Karbon Nanotüp ve Matris Modeli



Şekil 4: Fiber İçin Farklı Boyutlardaki Ağ Örgülerinin Kesit Görüntüleri; (a) 40 Eleman, (b) 60 Eleman, (c) 80 Eleman





Karbon nanotüp ve matris eşyönlü doğrusal elastik olarak kabul edilmiş olup malzeme özellikleri Tablo 1'de verilmiştir.

Tablo 1: Malzeme Özellikleri

	E [GPa]	V [-]
Karbon Nanotüp	1000	0.25
Polimer Matris (PEEK)	5	0.35

Tablo 2: Farklı (Cözüm	Ağlarından	Elde	Edilen	Sonuclar
	202ann	/ igiai iliaali	L 100	Lanou	Conaçiai

	İri çözüm ağı		Normal çö	Normal çözüm ağı		Sık çözüm ağı	
	Geleneksel Model	Gömülü Model	Geleneksel Model	Gömülü Model	Geleneksel Model	Gömülü Model	
Tepki Kuvveti [N]	79695	80105	79874	80308	79937	80383	
Eleman Sayısı	31400	50086	50850	78090	73900	125310	

Tablo 2'de iri, normal ve sık çözüm ağı kullanarak elde edilen tepki kuvvetleri karşılaştırılmıştır. Sonuçlar göstermiştir ki iki modelin tepki kuvvetleri arasında %0.5 düzeyinde bir farklılık bulunmaktadır. Bu örnek için gömülü eleman modelinin konvansiyonel sonlu eleman modeli ile tepki kuvvetleri açısından çok yakın sonuçlar verdiği söylenebilir.

Homojenize Edilmiş Elastisite Tensörünün Hesaplanması

Yöntem bölümünde anlatılan şekilde, elastisite tensörü Abaqus programındaki IVOL (integration volume point) değerinden yararlanılarak hesaplanmıştır. Bu hesaplamalarda temsili hacim elemanı Şekil 6'da gösterildiği gibi 1x1 boyutlarında olacak şekilde oluşturulmuştur. Oluşturulan model yaklaşık %3 fiber hacim oranına sahiptir. Sırasıyla altı farklı makroskopik şekil değiştirme verilerek elastisite tensörü bulunmuştur.



Şekil 6: Karbon Nanotüp ve Matrisin Modellenmesi

Konvansiyonel sonlu eleman yöntemi ile hesaplanan elastisite tensörü aşağıdaki gibidir:

	$[8.49 \times 10^3]$	4.51×10^{3}	4.47×10^{3}	0	0	ך 0	
	4.51×10^{3}	8.49×10^{3}	4.47×10^{3}	0	0	0	
<i>c</i> –	4.48×10^{3}	4.48×10^{3}	9.99×10^{3}	0	0	0	(4)
ι —	0	0	0	1.99×10^{3}	0	0	
	0	0	0	0	2.04×10^{3}	0	
	L O	0	0	0	0	2.04×10^{3}	

Gömülü eleman yöntemi kullanılarak hesaplanan katılık matrisi aşağıdaki gibi bulunmuştur:

	$[8.73 \times 10^3]$	4.58×10^{3}	4.54×10^{3}	0	0	ך 0	
	4.58×10^{3}	8.73×10^{3}	4.54×10^{3}	0	0	0	
c –	4.55×10^{3}	4.55×10^{3}	10.9×10^{3}	0	0	0	(5)
C –	0	0	0	2.08×10^{3}	0	0	
	0	0	0	0	2.16×10^{3}	0	
	L O	0	0	0	0	2.16×10^{3}	

Gömülü modeldeki elastisite tensörünün değerleri biraz daha yüksek çıkmıştır. Bunun sebebi, gömülü eleman modelinde fazladan bulunan matris ile açıklanabilir. Her ne kadar Python kodunda fiberin hacmi çıkarılarak işlem yapılmış olsa da bir miktar farklılık gözlenmektedir. Temsili hacim elemanının ortotropik olduğu kabul edilerek yukarıda verilmiş olan elastisite tensörü yardımıyla elde edilen ortotropik elastik sabitler (Young katsayısı, kesme katsayısı ve Poisson oranı) Tablo 3'te gösterilmiştir.

	E ₁ [MPa]	E₂ [MPa]	E₃ [MPa]
Gömülü model	5785.25	5784.22	7816.75
Geleneksel model	5523.63	5523.60	6913.70

Tablo 3: Geleneksel ve Gömülü Modellerden Elde Edilen Ortotropik Elastik Sabitler

	G ₁₂ [MPa]	G ₁₃ [MPa]	G ₂₃ [MPa]
Gömülü model	1078.45	1078.24	1038.03
Geleneksel model	1019.42	1019.41	995.78

	V ₁₂ [-]	V ₁₃ [-]	v ₂₃ [-]
Gömülü model	0.39	0.34	0.34
Geleneksel model	0.38	0.34	0.34

Yapılması Planlanan Çalışmalar

Buraya kadar yapılan hesaplamalarda incelenen temsili hacim elemanları bir tane nanotakviye malzeme içeren modelden oluşuyordu ve tek bir hacim oranı için analizler yapılmıştı. Gelen makul sonuçlardan sonra ilerleyen çalışmalarda birden çok nanotakviye içeren kompleks temsili hacim elemanının analizi yapılması planlanmaktadır. Nanotakviye malzemenin model içerisindeki dağılımının mekanik özelliklere olan etkisi incelenecektir. Farklı sınır koşullarının sonuçlara olan etkisini görebilmek adına, periyodik sınır koşullarıyla da aynı homojenleştirme işlemleri yapılması planlanan çalışmalar içindedir.

SONUÇ

Bu çalışmada karbon nanotüp ile güçlendirilmiş kompozit malzemelerin sonlu eleman analizi gömülü eleman yöntemiyle yapılmıştır. Temsili hacim elemanı kullanılarak kompozit malzemenin mekanik özellikleri homojenize edilmiştir. Ağ örgüsünün sıklığına bağlı olarak sonuçların yakınsadığı gösterilmiştir. Bu sonuçlar analizlerin daha kolay ve verimli yapılabilmesi için gömülü eleman yönteminin kullanılabileceğini göstermektedir.

Kaynaklar

Abaqus 6.14, "Documentation." Dassault Systèmes, 2014, 2014.

Krishnan A. Dujardin E. Ebbessen T. W. Yianilos P. N. Treacy M. M. J. 1998. Young's modulus of single-walled nanotubes. Phys. Rev. B, Vol.58, Issue 20, s. 14013

Liu H. Zeng D. Li Y. Jiang L. 2016. Development of RVE-embedded solid elements model for predicting effective elastic constants of discontinuous fiber reinforced composites. Mechanics of Materials Vol. 93, s. 109-123

Poncharal P. Wang Z. L. Ugarte D. de Heer W. A. 1999. *Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes*. Science, Vol.283 Issue 5407, s.1513

Srivastava A. Kumar D. 2018. *Mechanical characterization and postbuckling behavior of carbon nanotube–carbon fiber reinforced nanocomposite laminate*. Proc IMechE Part C: J Mechanical Engineering Science 2018, Vol. 232(1) s.106–123