

УДК 539.3

В.І. ГНІТЬКО, К.Г. ДЕГТЯРЬОВ, О.О. СТРЕЛЬНИКОВА  
Інститут проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України  
А.М. ТОНКОНОЖЕНКО  
Державне підприємство «Конструкторське бюро «Південне» ім. М.К. Янгеля»

## РОЗРАХУНКОВІ МОДЕЛІ ДЛЯ АНАЛІЗУ ЕФЕКТИВНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТРИВИМІРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ ІЗ СИСТЕМАМИ ВКЛЮЧЕНЬ

*Для опису механічних властивостей тривимірних композитів та нанокompозитів використовуються підходи, засновані на співвідношеннях механіки суцільного середовища. За припущеннями лінійної пружності розглянуті механічні властивості композиційних матеріалів та нанокompозитів. Застосовуються умови ідеального контакту і неklasичні умови Гуртіна-Мердока для опису нанорозмірного контакту між матрицею та включеннями на поверхні розділу, яка розглядається як еластична мембрана з власними пружними характеристиками та заданим поверхневим натягом. Розглянуті різні типи представницьких комірок. Для числової симуляції механічних властивостей композитних та нанокompозитних матеріалів використовуються методи скінченних та граничних елементів. У тривимірному формулюванні здійснено порівняння результатів, отриманих при використанні методу скінченних елементів (гексагональний репрезентативний об'ємний елемент) і методу граничних елементів (циліндричний репрезентативний об'ємний елемент). Метод скінченних елементів застосовано для визначення напружено-деформованого стану різних репрезентативних об'ємних елементів тривимірних нанокompозитів. Розглядаються матриці у вигляді куба та циліндра скінченних розмірів та неоднорідності у вигляді куль, сфер, циліндрів, волокон та трубок. Базовані на МСЕ розрахункові моделі поширено на опис ефективних пружних властивостей композитів з розподіленими нановключеннями з випадковою та впорядкованою орієнтаціями. Метод скінченних елементів застосовано для визначення НДС різних репрезентативних об'ємних елементів тривимірних нанокompозитів. Досліджено вплив форми і відносних розмірів неоднорідностей та матриць репрезентативного об'єму на ефективні модулі пружності нанокompозитів. Отримані моделі створюють інформативну базу для технологій синтезування нанокompозитів з вдосконаленими деформаційними і міцнісними характеристиками.*

*Ключові слова: тривимірні композити та нанокompозити, поверхні інтерфейсу, класичні та неklasичні умови контакту, методи скінченних та граничних елементів.*

К.Г. ДЕГТЯРЕВ, В.І. ГНІТЬКО, Е.А. СТРЕЛЬНИКОВА  
Інститут проблем машиностроения им. А.Н. Подгорного НАН Украины  
А.М. ТОНКОНОЖЕНКО  
Государственное предприятие Конструкторское бюро «Южное» им. М.К. Янгеля

## РАСЧЕТНЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ СТАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ТРЕХМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ С СИСТЕМАМИ ВКЛЮЧЕНИЙ

*Для описания механических свойств трехмерных композитов и нанокompозитов используются подходы, основанные на принципах механики сплошной среды. В предположениях линейной упругости рассмотрены механические свойства композиционных материалов и нанокompозитов. Для описания наноразмерного контакта между матрицей и включениями на поверхности раздела применяются как*

условия идеального контакта, так и неклассические условия Гуртина-Мердока; поверхность интерфейса рассматривается как эластичная мембрана со своими упругими характеристиками и заданным поверхностным натяжением. Разработан специальный алгоритм для численного решения разрушающих уравнений в случае, когда расчетная область представляет собой поверхность вращения. Рассмотрены различные типы представительных ячеек. Для численного анализа механических свойств композитных и нанокompозитных материалов используются методы конечных и граничных элементов. Для трехмерной задачи проведено сравнение результатов, полученных при использовании метода конечных элементов (гексагональный репрезентативный объемный элемент) и метода граничных элементов (цилиндрический репрезентативный объемный элемент). Метод конечных элементов применен для определения напряженно-деформированного состояния различных репрезентативных объемных элементов трехмерных нанокompозитов. Рассматриваются матрицы в виде куба и цилиндра конечных размеров и неоднородности в виде шаров, сфер, цилиндров, волокон и трубок. Основанные на методе конечных элементов расчетные модели обобщены для композитов с распределенными нановключениями случайной и упорядоченной ориентации. Исследовано влияние формы и относительных размеров неоднородностей и матриц репрезентативного объемного элемента на эффективные модули упругости нанокompозитов. Полученные модели создают информативную базу для технологий синтеза нанокompозитов с улучшенными деформационными и прочностными характеристиками.

*Ключевые слова:* трехмерные композиты и нанокompозиты, поверхности интерфейса, классические и неклассические условия контакта, методы конечных и граничных элементов.

K.G. DEGTYARIOV, V.I. GNITKO, O.O. STRELNIKOVA

A.N. Podgorny Institute for Mechanical Engineering Problems of the Ukrainian Academy of Sciences

A.M. TONKONozHENKO

M.K. Yangel Yuzhnoye State Design Office

## **CALCULATION MODELS FOR STATIC ANALYSIS OF THREE-DIMENSIONAL NANOCOMPOSITES WITH SYSTEMS OF INCLUSIONS**

*Approach based on the principles of continuum mechanics is used to estimate the mechanical properties of three-dimensional composites and nanocomposites. Mechanical properties of composites and nanocomposites are considered in the assumptions of linear elasticity. To describe the nanoscale contact between matrices and inclusions on the interface surface, the conditions of ideal contact and non-classical Gurtin-Murdoch conditions are used. The interface surface is regarded as an elastic membrane with its own elastic characteristics and a given surface tension. The special algorithm for numerical solution of resolving equations is developed when the integration area is a surface of rotation. In this case, static problems of determining the elastic characteristics of nanocomposites are reduced to systems of one-dimensional singular integral equations. Different types of representative volume elements are considered. Finite and boundary element methods are used in numerical estimation of the mechanical properties of composite and nanocomposite materials. For the three-dimensional problem, the results obtained using the finite element method (hexagonal representative volume element) and the boundary element method (cylindrical representative volume element) are compared. The finite element method is used to find out the stress-strain state of various representative volume elements of three-dimensional nanocomposites. The influence of shapes and relative sizes of inhomogeneities*

*and matrices of representative volumes on the effective elasticity modulus of nanocomposites is studied. Matrices in the form of cube and cylinder of finite sizes and inhomogeneity in the form of balls, spheres, cylinders, fibers and tubes are considered. Finite element-based calculation models are generalized to composites with distributed nanoinclusions of random and ordered orientation. The resulting models create an informative base for nanocomposites synthesis technologies with improved deformable and strength characteristics.*

*Keywords: three-dimensional composites and nanocomposites, interface surfaces, classical and non-classical contact conditions, finite and boundary element methods.*

### **Постановка проблеми**

До актуальних проблем лінійної теорії пружності відноситься вивчення пружних та механічних властивостей сучасних технологічно-інноваційних нанокompозитних матеріалів. Обґрунтованість результатів числового моделювання таких матеріалів вимагає належних математичних моделей, що адекватно описують структури нанорозмірних включень. Якщо аналіз зосереджений на взаємодії атомів у наноматеріалах, тоді відповідні моделі мають базуватися на принципах квантової механіки. Але якщо дослідження спрямовані на моделювання середніх механічних характеристик, середніх деформацій або ефективних пружних модулів, тоді для забезпечення ефективних оцінок можуть бути успішно застосовані підходи континуальної механіки. Більшість результатів у цій галузі пов'язано з двовимірними конфігураціями. Щодо тривимірних конфігурацій, то слід зазначити, що вони аналізувались переважно з припущеннями наявності сферичних частинок у нанокompозиті. Для цих форм нанонеоднорідностей доведено, що властивості міжфазних поверхонь можуть суттєво впливати як на пружні поля, так і на ефективні модулі композиційних матеріалів. Одним з основних напрямків сучасної механіки наномасштабних матеріалів є, так званий, багаторівневий підхід, метою якого є розширення області застосування класичної континуальної механіки шляхом суміщення її основних теоретичних принципів з ефектами, що спостерігаються на молекулярному рівні. Проблемі обчислення ефективних властивостей матеріалів при наявності проміжного шару між контактуючими фазами приділяється досить багато уваги. Актуальними залишаються проблеми визначення ефективних модулів композитів та нанокompозитів з урахуванням впливу поверхневих ефектів та за наявності систем впорядкованих та хаотично розташованих включень в представницьких комірках.

### **Аналіз останніх досліджень та публікацій**

Останнім часом в публікаціях, присвячених визначенню механічних властивостей нанокompозитів, вивчають ефекти наявності міжфазних поверхонь, які можуть суттєво впливати як на пружні поля, так і на ефективні модулі композиційних матеріалів. Модель Гуртіна–Мердока [1] пружної поверхні часто використовується в новітніх публікаціях стосовно нанокompозитів [2–3]. Ця модель виявляє залежність поверхневого напруження від розміру включення як важливої особливості нанокompозитів. Зауважимо, що граничні умови на поверхнях інтерфейсу як в теорії потенціалу, так і в задачах лінійної пружності, використовують ефект поверхневого натягу [4]. Більшість відомих результатів у цій галузі пов'язано з двовимірними об'єктами. Ці результати можуть бути класифіковані в такі категорії, залежно від застосованих методів: розв'язання статичних та динамічних задач для двовимірних нанокompозитів за допомогою методів комплексних змінних, мультипольного та хвильового розвинення [5–6], розв'язання статичних та динамічних задач для двовимірних нанокompозитів методом скінченних елементів [7–8]; дослідження

двовимірних статичних та динамічних задач для двовимірних нанокомпозитів методом граничних елементів [9]. Проте вивченню нанокомпозитів у тривимірному формулюванні приділено недостатньо уваги. В більшості робіт вивчаються впорядковані та невпорядковані системи лише сферичних включень або включень у вигляді циліндрів із закругленими торцями.

### Мета дослідження

Метою дослідження є створення розрахункової методики для оцінки ефективних модулів пружності тривимірних композитів та нанокомпозитів із поодинокими та взаємодіючими включеннями неканонічної форми на основі використання методів скінченних та граничних елементів.

### Викладення основного матеріалу дослідження

#### Метод граничних елементів в аксіально-симетричних задачах для пружного ізотропного тіла з неоднорідністю. Умови ідеального контакту

При застосуванні методу граничних елементів статичні задачі теорії пружності зводяться до двовимірних сингулярних рівнянь теорії пружності. В даній роботі розроблено спеціальний алгоритм для їх числового розв'язання у випадку, коли область інтегрування є поверхнею обертання. При цьому статичні задачі визначення пружних характеристик нанокомпозитів зводяться до розв'язання систем одновимірних сингулярних інтегральних рівнянь. Це дозволяє використовувати лише одну процедуру для визначення пружних характеристик, яка застосовується для опису пружних переміщень та зусиль як у матриці, так і у нановключенні. Розроблений метод редукованих граничних елементів застосовано для аналізу аксіально-симетричних задач лінійної ізотропної пружності для тіл з включеннями при використанні неklasичних граничних умов на поверхнях інтерфейсу. Для цих задач за допомогою фундаментальних розв'язків теорії пружності отримані граничні сингулярні інтегральні рівняння.

Розглянуто пружний скінченний циліндр (матрицю) з неоднорідністю (включенням). Припускалось, що неоднорідність має форму тіла обертання (рис. 1).

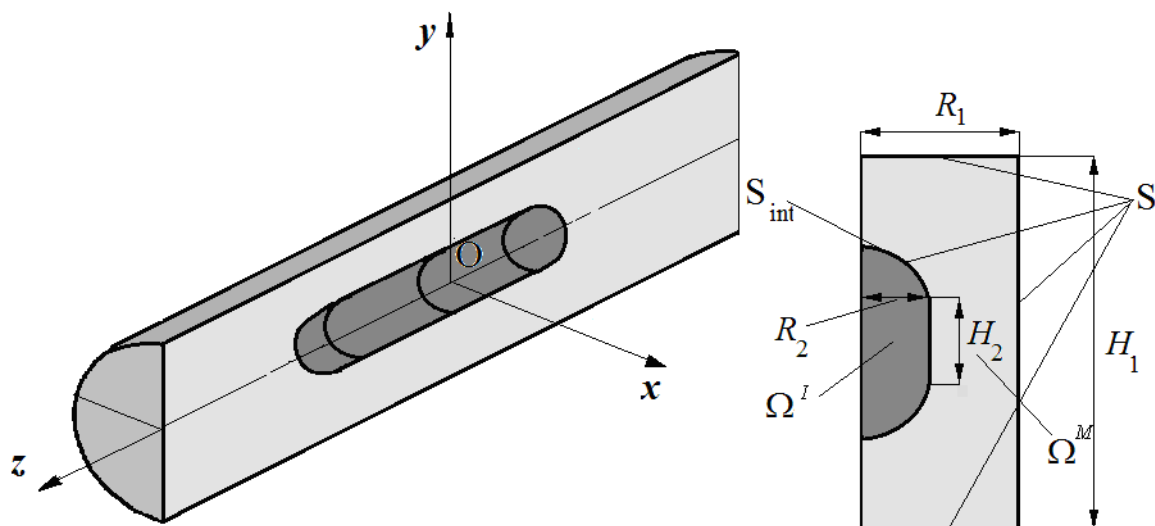


Рис.1. Представницька комірка у вигляді пружного циліндру з включенням, її ескіз та під-області.

Зовнішню межу матриці та її область позначено відповідно  $S^M$  і  $\Omega^M$ . Зовнішню межу включення та його область позначено як  $S^I$  та  $\Omega^I$ . Поверхня  $S^M = \partial\Omega^M$  є граничною

поверхнею тіла, що включає межу включення  $S^I$ , рис. 1. Слід зазначити, що  $S^I = S_{int}$  є поверхнею інтерфейсу між двома середовищами. Матеріал матриці  $\Omega^M$  задається модулем зсуву  $G^M$  та коефіцієнтом Пуассона  $\nu^M$  відповідно, тоді як матеріал включення  $\Omega^I$  характеризується механічними характеристиками  $G^I$  та  $\nu^I$ . Цей пружний циліндр з неоднорідністю розглядатиметься надалі як представницька комірка (ПК) – репрезентативний об’ємний елемент (РОЕ) для вивчення механічних властивостей композитів та наноккомпозитів.

Зв’язок між внутрішніми зусиллями пружного тіла та його зміщеннями може бути виражений граничним інтегральним рівнянням (тотожність Сомільяни) у такому вигляді:

$$\mathbf{C}\mathbf{u} = \iint_{\sigma} \mathbf{U}(P, P_0)\mathbf{t}(P)d\sigma - \iint_{\sigma} \mathbf{T}(P, P_0)\mathbf{u}(P)d\sigma + \iiint_{\Omega} \mathbf{U}(P, Q)\mathbf{f}d\Omega,$$

де  $\mathbf{C}$  – матриця зі сталими коефіцієнтами, яка залежить від положення точки  $P$  на поверхні  $\sigma$ ,  $\mathbf{U}(P, P_0) = \{U_{ij}\}$ ,  $\mathbf{T}(P, P_0) = \{T_{ij}\}$  – фундаментальний розв’язок Кельвіна

$$U_{ij}(P, P_0) = \frac{1}{16\pi(1-\nu)Gr} [(3-4\nu)\delta_{ij} + r_i r_j],$$

$$T_{ij}(P, P_0) = \frac{1}{8\pi(1-\nu)r^2} \left\{ [(1-2\nu)\delta_{ij} + 3r_i r_j] \frac{\partial r}{\partial \mathbf{n}} - (1-2\nu)(r_i n_j - r_j n_i) \right\}.$$

Тут  $r = (r_i r_i)^{1/2}$ ,  $r_i = x_i(P) - x_i(P_0)$ ,  $r_i = \partial r / \partial x_i(P) = r_i / r$ .

Вводимо матричні оператори:

$$\mathbf{A}(\sigma_1, \sigma_2)\mathbf{u} = \iint_{\sigma_1} \mathbf{T}(P, P_0)\mathbf{u}(P)d\sigma_1, \quad \mathbf{B}(\sigma_1, \sigma_2)\mathbf{t} = \iint_{\sigma_1} \mathbf{U}(P, P_0)\mathbf{t}(P)d\sigma_1, \quad P_0 \in \sigma_2.$$

Припустимо, що  $\partial\Omega^M = \Sigma_1 \cup \Sigma_2 \cup \Sigma_3$ ; при цьому  $\Sigma_1$  є частиною  $\partial\Omega^M$ , де задані переміщення, а  $\Sigma_2$  є частиною поверхні  $\partial\Omega^M$ , де задані зусилля, та  $\Sigma_3 = S_{int} = \partial\Omega^I$  є поверхнею інтерфейсу. Введення поверхонь  $\Sigma_1, \Sigma_2$  та  $\Sigma_3$  дає змогу визначити матричні оператори:

$$\mathbf{A}_{ij}^M = \mathbf{A}^M(\Sigma_i, \Sigma_j), \quad \mathbf{B}_{ij}^M = \mathbf{B}^M(\Sigma_i, \Sigma_j), \quad i, j = \overline{1,3}, \quad \mathbf{A}_{33}^I = \mathbf{A}^I(\Sigma_3, \Sigma_3), \quad \mathbf{B}_{33}^I = \mathbf{B}^I(\Sigma_3, \Sigma_3).$$

Позначимо як  $\mathbf{U}_i^M$  значення  $\mathbf{u}^M$  в вузлових точках поверхні  $\Sigma_i$ . Значення зусиль в цих саме вузлах є величинами  $\mathbf{T}_i^M (i=1, 2, 3)$ . Позначимо як  $\mathbf{U}_3^I$  та  $\mathbf{T}_3^I$  значення  $\mathbf{u}^I$  та  $\mathbf{t}^I$  в вузлових точках поверхні  $\Sigma_3$ . Тобто ми припускаємо, що векторні величини  $\mathbf{U}_1^M$  і  $\mathbf{T}_2^M$  є заданими. Далі з граничних умов отримуємо таку систему з чотирьох векторних інтегральних рівнянь для визначення шості невідомих векторів  $(\mathbf{T}_1^M, \mathbf{U}_2^M, \mathbf{U}_3^M, \mathbf{T}_3^M, \mathbf{U}_3^I, \mathbf{T}_3^I)$ :

$$-\mathbf{B}_{i1}^M \mathbf{T}_1^M + \mathbf{A}_{i2}^M \mathbf{U}_2^M + \mathbf{A}_{i3}^M \mathbf{U}_3^M - \mathbf{B}_{i3}^M \mathbf{T}_3^M = -\mathbf{A}_{i1}^M \mathbf{U}_1^M + \mathbf{B}_{i2}^M \mathbf{T}_2^M, \quad P_0 \in \Sigma_i \cap \Omega^M, \quad i=1,2,3;$$

$$\mathbf{A}_{33}^I \mathbf{U}_3^I - \mathbf{B}_{33}^I \mathbf{T}_3^I = 0, \quad P_0 \in \Sigma_3 \cap \Omega^I. \tag{1}$$

Як в класичних умовах, так і в умовах Гуртіна-Мердока виконується умова

неперервності переміщень на поверхні інтерфейсу  $S_{\text{int}}$ :

$$\mathbf{U}_3^M = \mathbf{U}_3^I. \quad (2)$$

Отримавши  $\mathbf{U}_3^I$  з четвертого рівняння в системі (1) та підставивши його в перші три рівняння в (1), маємо:

$$-\mathbf{B}_{i1}^M \mathbf{T}_1^M + \mathbf{A}_{i2}^M \mathbf{U}_2^M + \mathbf{C}_{i3} \mathbf{T}_3^I - \mathbf{B}_{i3}^M \mathbf{T}_3^M = -\mathbf{A}_{i1}^M \mathbf{U}_1^M + \mathbf{B}_{i2}^M \mathbf{T}_2^M, \quad P_0 \in \Sigma_i \cap \Omega^M, i=1,2,3, \quad (3)$$

де  $\mathbf{C}_{i3} = \mathbf{A}_{i3}^M (\mathbf{A}_{33}^I)^{-1} \mathbf{B}_{33}^I$ .

Отримавши  $\mathbf{T}_1^M$  і  $\mathbf{U}_2^M$  з рівнянь (3), приходимо до такого зв'язку між невідомими  $\mathbf{T}_3^M$  і  $\mathbf{T}_3^I$ :

$$\mathbf{D}_1 \mathbf{T}_3^M + \mathbf{D}_2 \mathbf{T}_3^I = \mathbf{D}_3 \mathbf{U}_1^M + \mathbf{D}_4 \mathbf{T}_2^M, \quad P_0 \in S_{\text{int}}.$$

У випадку ідеального контакту маємо

$$\mathbf{T}_3^M = \mathbf{T}_3^I. \quad (4)$$

Таким чином, приходимо до такого інтегрального рівняння:

$$(\mathbf{D}_1 + \mathbf{D}_2) \mathbf{T}_3^I = \mathbf{D}_3 \mathbf{U}_1^M + \mathbf{D}_4 \mathbf{T}_2^M, \quad P_0 \in S_{\text{int}}, \quad (5)$$

де невідомі  $\mathbf{T}_3^I$  обчислюються лише в вузлах поверхні інтерфейсу  $S_{\text{int}}$ .

Надалі використовуються циліндричні координати; інтеграція за радіальною координатою дозволяє звести тривимірні задачі до розв'язання систем сингулярних інтегральних рівнянь, які потребують лише обчислення одновимірних інтегралів. Фундаментальні розв'язки та їх похідні виражаються в цьому випадку через повні еліптичні інтеграли. Для їх числового визначення запропоновано ефективний алгоритм, заснований на формулі Гаусса з використанням середнього арифметико-геометричного значення. Числовий розв'язок граничних інтегральних рівнянь здійснюється таким чином, що невідомі розподіляються лише по поверхнях інтерфейсу. Для перевірки збіжності запропонованого числового алгоритму досліджені напруження в довгому пружному циліндрі, для цій задачі наявний аналітичний розв'язок.

### Некласичні умови Гуртіна-Мердока

Для вивчення впливу розміру в мікро- та наномасштабі застосовується теорія Гуртіна-Мердока, що дозволяє описати нанорозмірний контакт між матрицею та включеннями. Це призводить до некласичних граничних умов на поверхні інтерфейсу  $S_{\text{int}}$ . Ця поверхня розглядається як еластична мембрана зі власними пружними характеристиками, такими як коефіцієнти Ламе  $\lambda^S$  і  $G^S$ , і заданим поверхневим натягом  $\tau_0$ . Її переміщення  $\mathbf{u}^S$ , деформації  $\boldsymbol{\varepsilon}^S$  та напруження  $\boldsymbol{\sigma}^S$  описуються рівняннями [1]:

$$\text{div}_S \boldsymbol{\sigma}^S = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}, \quad \boldsymbol{\sigma}^S = \tau_0 \mathbf{I}_\tau + 2(G^S - \tau_0) \boldsymbol{\varepsilon}^S + (\lambda^S - \tau_0) (\text{tr } \boldsymbol{\varepsilon}^S) \mathbf{I}_\tau + \tau_0 \nabla_S \mathbf{u}^S,$$

де  $\mathbf{I}_\tau$  є одиничним дотичним тензором,  $\operatorname{div}_S, \nabla_S$  – поверхневі дивергенція та градієнт.

Ця модель передбачає неперервність вектору переміщень на поверхні інтерфейсу

$$\mathbf{U}_3^M = \mathbf{U}_3^I = \mathbf{U}_3^S. \quad (6)$$

При врахуванні неklasичних умов Гуртіна-Мердока, ми використовуємо рівняння (6) та додатковий диференціальний зв'язок, що має вигляд [2–3]:

$$\mathbf{T}_3^I - \mathbf{T}_3^M = \mathbf{G}\mathbf{U}_3^S.$$

Тут диференціальний оператор  $\mathbf{G}$  другого порядку отримано за допомогою узагальненого рівняння Лапласа-Юнга:

$$\mathbf{G} = \nabla_S \boldsymbol{\sigma}^S = [\boldsymbol{\sigma}]\mathbf{n}; \quad [\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma}^I - \boldsymbol{\sigma}^M, \quad [\sigma_{ij}]n_i n_j = \sigma_{\alpha\beta}^S \chi_{\alpha\beta},$$

де  $\chi_{\alpha\beta}$  є тензором кривини.

Тобто маємо

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1 \mathbf{G}_1) \boldsymbol{\Gamma}_i^I = \mathbf{D}_3 \mathbf{U}_1^M + \mathbf{D}_4 \mathbf{T}_2^M, \quad P_0 \in S_{\text{int}}, \quad \mathbf{G}_1 = \mathbf{I} - \mathbf{G}(\mathbf{A}_{33}^I)^{-1} \mathbf{B}_{33}^I.$$

Зауважимо, що тут всі невідомі виражаються через  $\mathbf{T}_3^I$ .

В аксіально-симетричному формулюванні проводимо трансформування від декартової системи координат  $(x, y, z)$  до циліндричної  $(\rho, \theta, z)$  за допомогою співвідношень:

$$x = \rho \cos \theta; \quad y = \rho \sin \theta; \quad z = z.$$

Ядра в інтегральних операторах  $\mathbf{A}$  і  $\mathbf{B}$  зображено як в роботах [10–11]:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^D(\Sigma, \Sigma) &= \mathbf{C}^D + \{T_{ij}^D(P, P_0)\}, \quad \mathbf{B}^D(\Sigma, \Sigma) = \{U_{ij}^D(P, P_0)\}, \quad i, j = \rho, z. \\ T_{ij}^D(P, P_0) &= T_{ij}^{1D} E(k) + T_{ij}^{2D} K(k), \quad U_{ij}^D(P, P_0) = U_{ij}^{1D} E(k) + U_{ij}^{2D} K(k), \\ T_{ij}^{kD} &= 2G^D (T_{ij}^{krD} n_r + T_{ij}^{kzD} n_z), \quad D = M, I. \end{aligned}$$

Компоненти ядер для переміщень  $U_{ij}^{1D}, U_{ij}^{2D}$  та зусиль  $T_{ij}^{1D}, T_{ij}^{2D}$  отримані в роботах [4, 11]. Зауважимо, що компоненти  $U_{ij}^{1D, 2D}$  і  $T_{ij}^{2D}$  є регулярними. Але існує сингулярність в компонентах для переміщень, яка має логарифмічний характер внаслідок асимптотичної поведінки еліптичного інтеграла  $K(k)$  при  $k \rightarrow 1$ . Для обчислення цих інтегралів застосовується спеціальна методика [6]. В [5, 12] доведено, що компоненти  $T_{11}^{1D}, T_{22}^{1D}$  є регулярними, але компоненти  $T_{12}^{1D}, T_{21}^{1D}$  мають нескінченні розриви. Для їх числового визначення використано методику, запропоновану в роботах [13–15].

Перевірку збіжності методу граничних елементів при розв'язанні аксіально-симетричних задач здійснено в роботі авторів [16].

В даній роботі на основі методів, розвинених в [13–16], розрахунки ефективних модулів здійснено з урахуванням поверхневих ефектів.

Розглянемо циліндричну представницьку комірку з включенням у формі закругленого циліндра, рис.1. Для числового моделювання обрані такі значення констант матеріалів і геометричні розміри:  $E^I = 1000 \text{ GPa}$ ,  $E^M = 100, 20 \text{ GPa}$ ,  $\nu^I = \nu^M = 0.3$ ,  $H_1 = 100 \text{ нм}$ ,  $H_2 = 40 \text{ нм}$ ,  $R_1 = 10 \text{ нм}$ ,  $R_2 = 50 \text{ нм}$ . Ці дані відповідають гексагональному РОЕ з гексагональною основою  $a = 11 \text{ нм}$ , який досліджено у роботі [17], з використанням методу скінченних елементів. Для оцінки впливу врахування ефектів поверхні інтерфейсу з неklasичними умовами в нашому чисельному дослідженні використовуються дані, наведені в [18]. А саме:  $\lambda^S = 3.48 \text{ Н/м}$ ,  $G^S = -6.218 \text{ Н/м}$ ,  $\tau_0 = 1,7 \text{ Н/м}$ . Далі ми використовуємо спрощену формулу оцінки ефективного пружного модуля  $E_z$  [17, 19], тобто  $E_z = (F \cdot H_1) / (\Delta H_1 \cdot S_b)$ , де  $F$  – осьове рівномірне навантаження,  $\Delta H_1 / H_1$  – осьова деформація, отримана числовим методом,  $S_b$  – площа основи репрезентативного об'єму. Порівняння результатів, отриманих за допомогою методу скінченних елементів (шестикутна призматична ПК) та методу граничних елементів (циліндрична ПК), наведено в табл. 1.

Таблиця 1

Порівняння результатів для ефективних модулів

$E^I/E^M$	$E_z/E^M$		
	МСЕ, [19]	МГЕ, умови ідеального контакту	МГЕ, умови Гуртіна-Мердока
10	1.046	1.053	1.124
50	1.197	1.201	1.309

Аналіз цих результатів свідчить про те, що ефективні модулі пружності, обчислені з використанням МСЕ та МГЕ у випадку ідеальних умов контакту, є добре узгодженими та корегують з даними інших дослідників. Врахування впливу ефекту неklasичних умов збільшує ефективний пружний модуль приблизно на 10%. Запропонований підхід, заснований на МГЕ, дозволяє використовувати репрезентативні об'ємні елементи з неklasичними умовами Гуртіна-Мердока на інтерфейсних поверхнях для кваліфікованих оцінок ефективного модуля пружності нанокompозитів.

### Метод скінченних елементів при дослідженні композитів та нанокompозитів із впорядкованими та невпорядкованими системами включень

Розроблені в [16] математичні та розрахункові моделі на основі МСЕ дозволяють проводити аналіз наноматеріалів із сферичними суцільними або порожнистими включеннями, а також з короткими нановолокнами та нанотрубками.

Досліджено серію нанокompозитних матеріалів на основі епоксидної матриці з вуглецевими наповнювачами різної форми. Застосовані суцільні сферичні, циліндричні, волокнисті й порожнисті сферичні включення. За допомогою програмного комплексу знайдено і досліджено залежність міцносних характеристик нанокompозитного матеріалу від розміру, форми, засобу розміщення вуглецевих нанонаповнювачів, а також рівня заповнення матриці включеннями.

Вважалось, що матриця нанокompозиту зі затверділої епоксидної смоли має такі



анізотропні властивості: густина  $\rho_M = 1160 \text{ кг/м}^3$ , модуль пружності  $E_M = 3,78 \text{ ГПа}$ , коефіцієнт Пуассона  $\nu_M = 0,35$ .

Як матеріал включення, розглянуті вуглецеві наповнювачі з ортотропними властивостями: густина  $1800 \text{ кг/м}^3$ , модуль пружності в напрямку  $OX$ ,  $E_1 = 290 \text{ ГПа}$ , модуль пружності в напрямку  $OY$ ,  $E_2 = 23 \text{ ГПа}$ , модуль пружності в напрямку  $OZ$ ,  $E_3 = 23 \text{ ГПа}$ , коефіцієнт Пуассона в напрямку  $XY$ ,  $\nu_{12} = 0,2$ , коефіцієнт Пуассона в напрямку  $YZ$ ,  $\nu_{23} = 0,4$ , коефіцієнт Пуассона в напрямку  $XZ$ ,  $\nu_{13} = 0,2$ , модуль зсуву в напрямку  $XY$ ,  $G_1 = 9 \text{ ГПа}$ , модуль зсуву в напрямку  $YZ$ ,  $G_2 = 214 \text{ ГПа}$ , модуль зсуву в напрямку  $XZ$ ,  $G_3 = 9 \text{ ГПа}$ .

В результаті проведених розрахункових досліджень з'ясовані механічні характеристики нових нанокompatитного матеріалу.

### Впорядковані сферичні включення

Досліджено кубічні матриці зі структурованими сферичними нановключеннями. Проаналізовано ряд включень з діаметром  $1 \text{ нм}$  та об'ємною долею від  $0,025$  до  $0,25$ . Розрахункові моделі нанокompatиту для об'ємної долі включень, рівної  $0,2$ , подані на рис. 2.

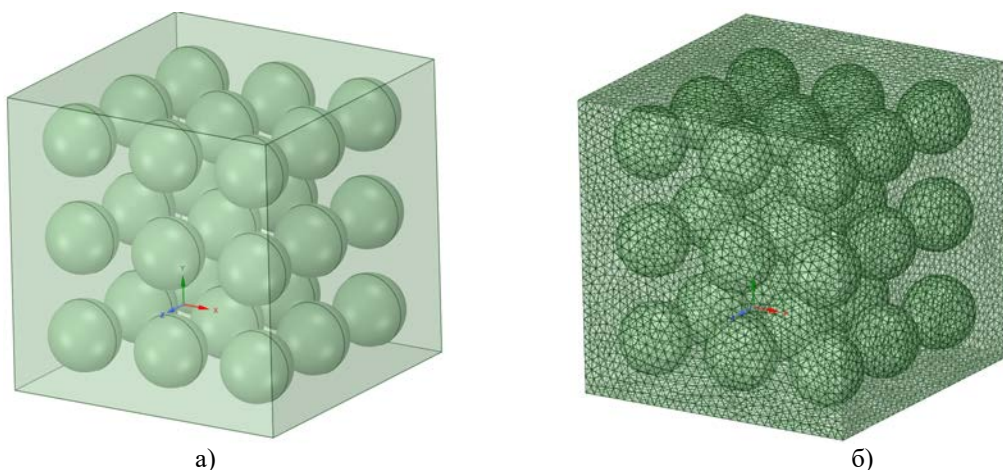


Рис. 2. Представницька комірка (а) та скінченно-елементна (б) модель наноматеріалу з впорядкованою структурою зі сферичних включень.

Результати розрахунків містяться в табл. 2. Розрахунок проведено за припущення ізотропності вуглецевого нановключення. Отримано наноматеріал із ізотропними властивостями.

Таблиця 2

### Механічні властивості нанокompatиту з впорядкованими сферичними включеннями

Об'ємна частка	0,025	0,05	0,075	0,1	0,125	0,15	0,175	0,2	0,225	0,25
$E_1$ , МПа	4002	4252,2	4532,5	4844,3	5193,4	5582,5	6018	6503,3	7041	7639,6
$E_2$ , МПа	4002	4252,2	4532,5	4844,3	5193,3	5582,5	6017,8	6503,1	7041	7639,9
$E_3$ , МПа	4002	4252,2	4532,5	4844,3	5193,2	5582,5	6017,7	6502,9	7041	7640,1
$G_{12}$ , МПа	1454	1509,2	1564,3	1619,9	1676,7	1734,8	1795	1857,1	1921,5	1988,9
$G_{23}$ , МПа	1454	1509,2	1564,3	1619,9	1676,7	1734,8	1795	1857,1	1921,5	1988,9
$G_{31}$ , МПа	1454	1509,2	1564,3	1619,9	1676,7	1734,8	1795	1857,1	1921,5	1988,9
$\nu_{12}$	0,345	0,3409	0,3355	0,3296	0,3231	0,3160	0,3083	0,3000	0,2913	0,2821
$\nu_{13}$	0,345	0,3409	0,3355	0,3296	0,3231	0,3160	0,3084	0,3001	0,2913	0,2820
$\nu_{23}$	0,345	0,3409	0,3355	0,3296	0,3231	0,3160	0,3084	0,3001	0,2913	0,2820
Густина	1176	1192	1208	1224	1240	1256	1272	1288	1304	1320

Таким чином, введення ізотропних сферичних вуглецевих включень в нанорозмірну матрицю привело до зміцнення та підвищення густини нового матеріалу. Графіки залежностей механічних властивостей нанокompозиту від об'ємної частки включення подані на рис. 3.

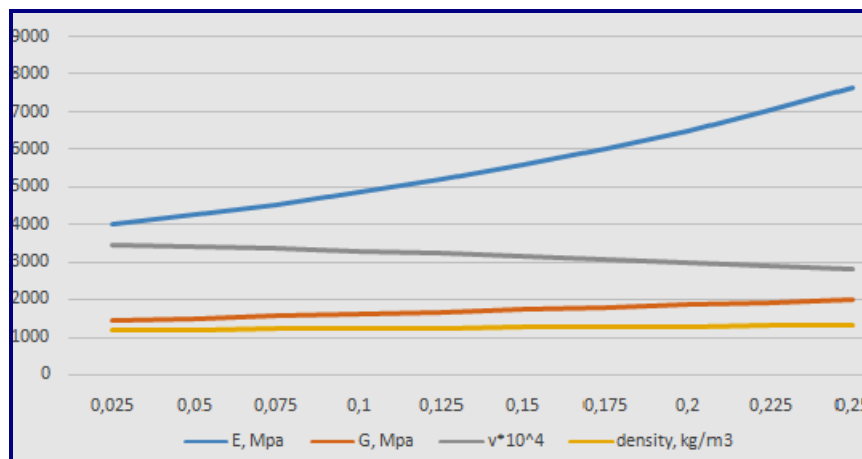


Рис. 3. Залежності механічних властивостей нанокompозиту від об'ємної частки включення.

Результати дослідження нанокompозиту з впорядкованими сферичними включеннями демонструють зростання міцносних характеристик матеріалу разом зі зростанням об'ємної частки включень. Водночас з міцносними характеристиками зростає й густина нового матеріалу, що може мати негативні наслідки для деяких конструкцій. Але використання ізотропного сферичного наповнювача за наявності впорядкованої структури включень дає змогу побудувати якісний ізотропний зміцненого матеріалу: без утворення будь-яких дефектів.

#### Невпорядковані сферичні включення

Досліджено кубічну матрицю, що містить неструктуровані сферичні нановключення з випадковим розподілом. Проаналізовано включення діаметром 1nm з об'ємною часткою від 0,025 до 0,25. Розрахункові моделі нанокompозиту з об'ємною часткою включень, рівною 0.2, подані на рис. 4.

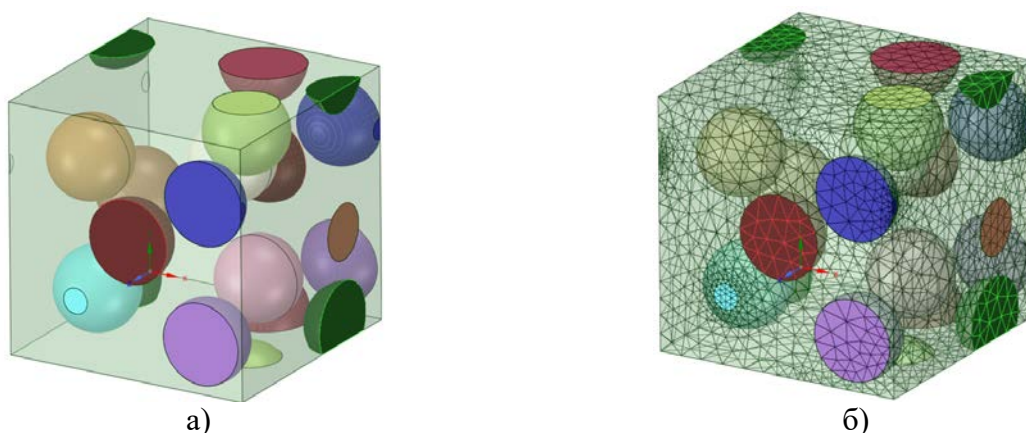


Рис. 4. Представницька комірка (а) і скінченно-елементна (б) модель наноматеріалу з невпорядкованими сферичними включеннями.

Результати розрахунків подані в табл. 3, розглянуті включення однакового

розміру з ортотропними властивостями матеріалу.

Ці результати свідчать, що використання ортотропних включень з випадковим розподілом також веде до ортотропного зміцнення нанокompозитного матеріалу та зростання його густини, як і в разі впорядкованого розташування включень. Однак, результуючі механічні характеристики неструктурованого нанокompозиту виявились нижчими, ніж у разі структурованих нановключень при однаковій об'ємній частці включень та однаковій густині матеріалу.

Таблиця 3

Механічні властивості нанокompозиту з невпорядкованими сферичними включеннями

Об'ємна частка	0,0387	0,0582	0,0775	0,116	0,1357	0,1550	0,1936	0,2132	0,2326	0,252
$E_1$ , МПа	4106,7	4251,4	4470,7	4826	5056,6	5265,2	5773,7	6017	6456,9	6399,4
$E_2$ , МПа	4106,7	4251,4	4470,7	4826	5056,6	5265,2	5773,7	6017	6456,9	6399,4
$E_3$ , МПа	4022,5	4139,6	4273,4	4531	4693,6	4816	5155,8	5277	5466,6	5707,8
$G_{12}$ , МПа	1482,4	1530,1	1570,1	1683	1788,3	1778,2	1910,7	1988,4	2050,1	2095,1
$G_{23}$ , МПа	1487,9	1532,8	1574,2	1660	1704,2	1770,7	1886,8	1955,4	2009,6	2086,3
$G_{31}$ , МПа	1482,6	1533,5	1577,9	1685	1725,5	1796,8	1893,2	1987,8	2040,3	2112,4
$\nu_{12}$	0,3450	0,3434	0,3432	0,3432	0,3431	0,3387	0,3328	0,3389	0,3325	0,3190
$\nu_{13}$	0,3476	0,3476	0,3427	0,3413	0,3420	0,3368	0,3361	0,3277	0,3317	0,3397
$\nu_{23}$	0,3528	0,3523	0,3519	0,3491	0,3516	0,3508	0,3559	0,3506	0,3595	0,3549
Густина	1185	1197	1210	1234	1247	1259	1284	1296	1309	1321

Вочевидь, головні причини цього явища полягають в ортотропності вуглецевого наповнювача та змінному заповненні матриці неструктурованими нановключеннями. Негативний вплив змінності заповнення нівелюється зростанням маси наноматеріалу в багатьох конструкціях, однак може виявитися суттєвим в таких конструкціях як покриття, плівки, тонкі пластини і т. ін., де застосовуються невеликі маси наноматеріалу.

#### Порожнисті сферичні включення

Досліджено представницьку комірку нанокompозиту на основі кубічної матриці і порожнистих сферичних неструктурованих включень з діаметром 1нм й товщиною стінки 0,1нм. Розподіл включень всередині матриці обрано таким же, як і при дослідженні суцільних сферичних включень, об'ємна доля включень змінювалась від 0,025 до 0,25. Розрахункові моделі нанокompозиту з об'ємною часткою включень, рівною 0,2, подані на рис. 4.

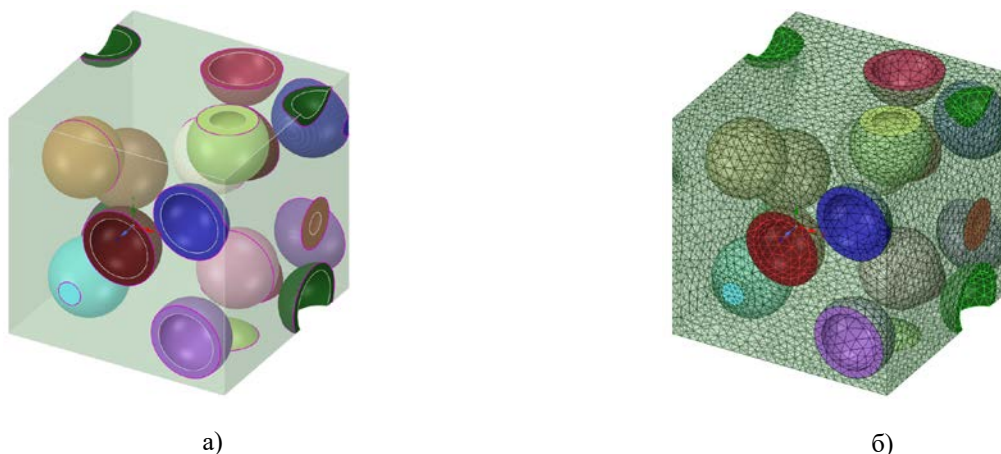


Рис. 4. Представницька комірка (а) і скінченно-елементна (б) модель наноматеріалу з порожнистими сферичними невпорядкованими включеннями.

Результати розрахунків подані в табл. 4, аналіз проведено для порожнистих включень однакового розміру, з ортотропними властивостями матеріалу.

Як і в попередніх випадках, новий наноккомпозит демонструє зростання міцносних характеристик зі збільшенням об'ємної частки включень, однак це зростання є більш повільнішим, ніж в разі суцільних сферичних включень.

Таблиця 4

Механічні властивості наноккомпозиту з порожнистими сферичними включеннями

Об'ємна частка	0,0387	0,0581	0,0775	0,1162	0,1355	0,1548	0,1935	0,2133	0,2324	0,2520
$E_{11}$ , МПа	3989,9	4089,8	4224,8	4467,8	4574,8	4673,1	4928	5079,9	5268,8	5388,7
$E_{22}$ , МПа	3868,7	3905,6	3950,2	4036,8	4078,2	4122,9	4208,6	4261,1	4307,7	4356
$E_{33}$ , МПа	3864,5	3907,7	3954,2	4041,7	4084,9	4125,8	4215,1	4259,9	4305,2	4353,2
$G_{12}$ , МПа	1430,4	1446,9	1461,6	1494,7	1510	1525	1558,3	1578,3	1593,7	1611
$G_{23}$ , МПа	1430,1	1445,5	1460,8	1490,4	1507,6	1523,4	1556,5	1574,5	1591	1608,1
$G_{31}$ , МПа	1430,1	1445,6	1462,1	1492,8	1508,8	1525,9	1558,9	1579,1	1594,4	1613,2
$\nu_{12}$	0,3493	0,3506	0,3509	0,3515	0,3514	0,3512	0,3517	0,3510	0,3505	0,3508
$\nu_{13}$	0,3507	0,3497	0,3496	0,3498	0,3493	0,3499	0,3502	0,3514	0,3522	0,3520
$\nu_{23}$	0,3510	0,3510	0,3520	0,3526	0,3527	0,3519	0,3517	0,3524	0,3540	0,3530
Густина	1149	1144	1138	1127	1122	1116	1105	1099	1094	1089

Відмінною рисою цього наноккомпозиту є те, що густина матеріалу зменшується зі зростанням об'ємної частки включень. Ця риса разом із загальним зміцненням наноматеріалу (у порівнянні з матеріалом без включень), робить його конче привабливим в інженерних розробках.

#### Невпорядковані циліндричні включення

Проведено дослідження невпорядкованих циліндричних включень. Зауважимо, що в залежності від форми циліндричних включень цілком ймовірна поява переплетених волокон, що може позитивно вплинути на міцносні властивості наноккомпозиту. Проаналізовані включення діаметром 1нм, з відношенням довжини до товщини як 1:2 та об'ємною часткою від 0,025 до 0,25. Розрахункові моделі наноккомпозиту з об'ємною часткою включень, рівною 0.2, подані на рис. 5.

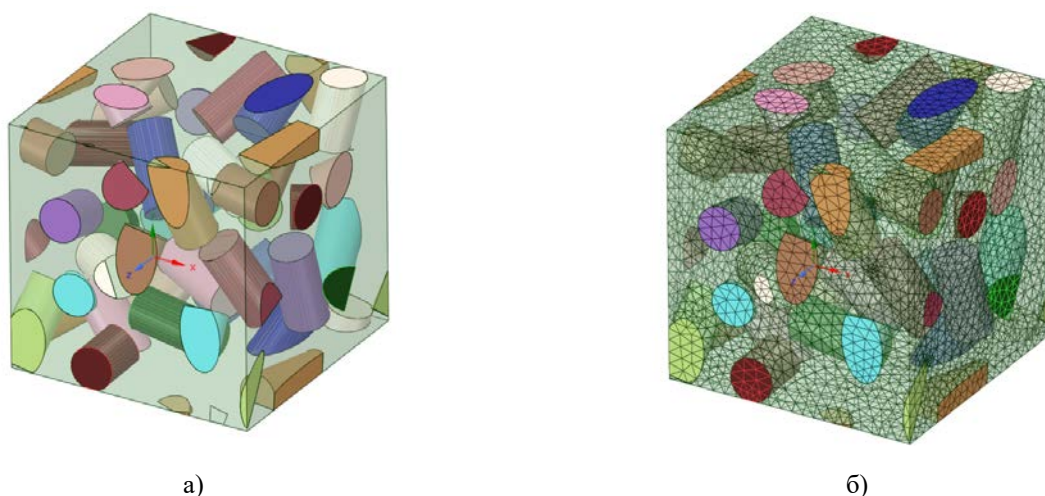


Рис. 5. Представницька комірка (а) і скінченно-елементна (б) модель наноматеріалу з циліндричними невпорядкованими включеннями.



циліндричними невпорядкованими включеннями.

Результати розрахунків подані в таблиці 5, вивчались довгасті циліндричні включення однакового розміру, з ортотропними властивостями матеріалу.

Як і для нанокompозиту з вуглецевими сферичними включеннями неструктурованого типу, ортотропні властивості композиту з циліндричними включеннями здебільшого залежать від розподілу включень всередині композиту, й можуть бути усереднені шляхом використання як більш об'ємних матриць, так і й більшої кількості включень.

Таблиця 5

Механічні властивості нанокompозиту з циліндричними включеннями

Об'ємна частка	0,0256	0,0504	0,0752	0,1069	0,1369	0,1637	0,1855	0,2017	0,2407	0,2813
$E_1$ , МПа	3981,6	4114,2	4496	4788,9	5396,6	5281,3	5306,9	5348,3	5967,9	7936,8
$E_2$ , МПа	3999,7	4213,9	4332,8	4762,9	4949,4	4975,9	6318,7	5937,5	6295	6366,4
$E_3$ , МПа	3997,7	4184	4386,6	4585,5	4859,2	5797,2	5464,1	5797,2	6411	6250,2
$G_{12}$ , МПа	1472,1	1533,4	1629,6	1754,3	1906	1853	1949,8	2001,3	2203,1	2413,8
$G_{23}$ , МПа	1473,5	1583,7	1621,6	1697	1805,6	1851	2152,7	2273,5	2302,7	2405,8
$G_{31}$ , МПа	1467,8	1537,5	1636,2	1759,6	1862,2	2242,2	2008,5	2007,9	2216,9	2595,2
$\nu_{12}$	0,3464	0,3388	0,3448	0,3332	0,3337	0,3552	0,2697	0,3067	0,3158	0,3030
$\nu_{13}$	0,3456	0,3433	0,3424	0,3511	0,3426	0,3186	0,3483	0,3158	0,3141	0,3545
$\nu_{23}$	0,3460	0,3457	0,3437	0,3411	0,3537	0,2854	0,3454	0,3306	0,3058	0,3573
Густина	1176	1192	1208	1228	1247	1264	1278	1289	1314	1340

Оскільки міцносні властивості вуглецевого наповнювача в напрямку однієї з осей суттєво вище, ніж в напрямку інших, тому числові значення механічних характеристик зростають вкрай неоднорідно з ростом об'ємної частки, хоча й демонструють значне зростання в цілому. В деяких розрахунках міцносні характеристики матеріалу з циліндричними нановключеннями вище, ніж для матеріалу із сферичними, однак випадковий засіб заповнення не дозволяють їх передбачити.

**Невпорядковані волокнисті включення**

Аналогічно дослідженню матриць з циліндричними включеннями, виконаний аналіз нанокompозитів з наповнювачем у вигляді частково впорядкованих повздовжніх вуглецевих волокон. Вуглецеві нановолокна розташовані вздовж всієї довжини матриці, мають діаметр 1нм, й максимально допустиме відхилення від головної осі складає 10 градусів. Проаналізовано об'ємну частку включень від 0,025 до 0,25. Розрахункові моделі нанокompозиту з об'ємною часткою включень, що дорівнює 0,2, подані на рис. 6.

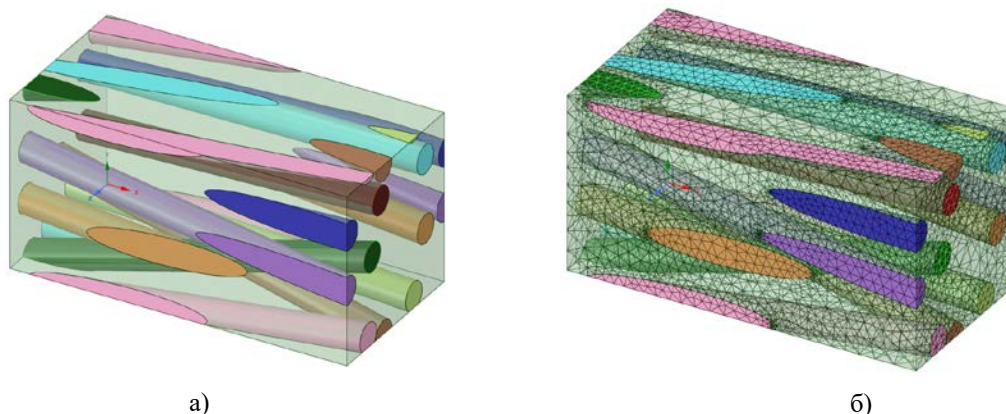


Рис. 6. Представницька комірка (а) і скінченно-елементна (б) модель наноматеріалу з волокнистими частково впорядкованими включеннями.

Результати розрахунків подані в табл. 6, вивчались волокнисті вуглецеві включення однакового розміру й ортотропними властивостями матеріалу.

З'ясовано, що застосування включень у вигляді вуглецевих нановолокон демонструє зростання міцносних характеристик матеріалу в напрямку волокон. За однакової об'ємної частки включень, зміцнення матеріалу волокнами виявилось більш, ніж в 10 разів ефективнішим в порівнянні зі зміцненням циліндричними або сферичними включеннями з того ж матеріалу.

Таблиця 6

Механічні властивості нанокompозиту з волокнистими включеннями

Об'ємна частка	0.0259	0.0504	0.0764	0.1002	0.1261	0.1510	0.1791	0.2039	0.2294	0.2525
$E_1$ , МПа	7815,8	14788	22541	30985	35518	39187	40591	40471	50946	58330
$E_2$ , МПа	4205,3	4419,4	4621	4780,1	4934,2	5106,1	5378,5	5568,8	5753,8	6301,5
$E_3$ , МПа	4090,2	4397,9	4589	4791,8	5027,8	5160,1	5398,8	5511,3	5723,5	6012,1
$G_{12}$ , МПа	1483,7	1524,9	1675	1636,7	1870,3	1815,5	1915	1959	2200,6	2385,2
$G_{23}$ , МПа	1447,2	1490,8	1544	1584,5	1629,8	1689,3	1761,7	1814,7	1885,8	1911,8
$G_{31}$ , МПа	1686,4	1576,8	1601	1654,8	1794,2	1838,1	2246,9	2477,5	2340,9	2113,5
$\nu_{12}$	0,3220	0,3382	0,3242	0,3384	0,3900	0,3596	0,3160	0,2549	0,3242	0,3707
$\nu_{13}$	0,4032	0,3623	0,3451	0,3377	0,3218	0,3333	0,4448	0,5065	0,4638	0,3199
$\nu_{23}$	0,4333	0,4775	0,4885	0,4979	0,4876	0,4909	0,4783	0,4785	0,4779	0,4785
Густина	1176	1192	1211	1224	1240	1256	1274	1290	1306	1321

Крім значного зміцнення, яке характеризується модулем  $E_1$ , відбулося також й зміцнення в інших напрямках, близьке за рівнем у порівнянні з іншими видами включень.

### Впорядковані волокнисті включення

Досліджені матриці з наповнювачем у вигляді повздовжніх та впорядкованих за схемою діаманта вуглецевих волокон. Вуглецеві нановолокна розташовані вздовж всієї довжини матриці, мають діаметр 1нм, напрямок волокон співпадає з напрямком однієї з осей координат. Проаналізовано об'ємну долю включень від 0,025 до 0,25. Розрахункові моделі нанокompозиту з об'ємною часткою включень, рівної 0,2, подані на рис. 7.

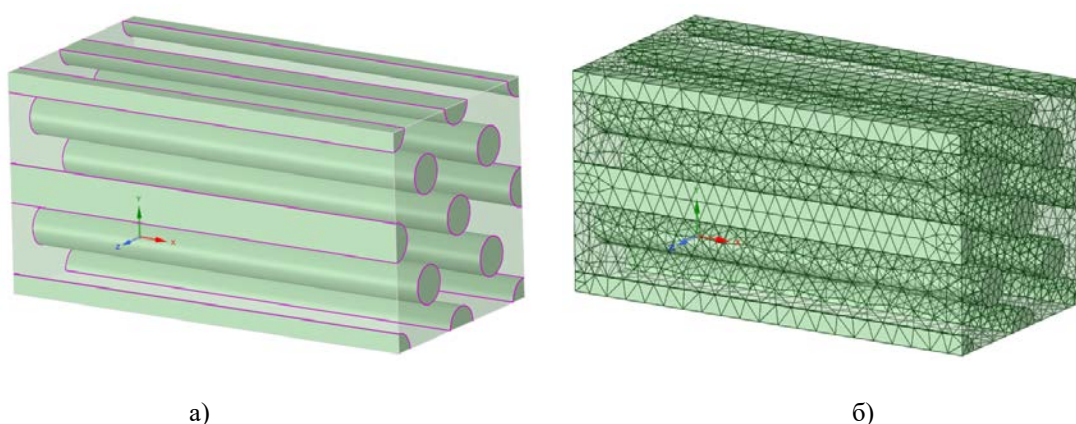


Рис. 7. Представницька комірка (а) і скінченно-елементна (б) модель наноматеріалу з впорядкованими волокнистими включеннями.

Результати дослідження надані в табл. 7, розрахунки проведено для волокнистих вуглецевих включень однакового розміру, з ортотропними властивостями матеріалу.

Як і в попередньому випадку, застосування наповнювача у вигляді вуглецевих волокон демонструє зростання міцносних характеристик матеріалу матеріал в напрямку волокон. У порівнянні з частково впорядкованими волокнами, повне структуроване впорядкування ще більш підвищило міцносні властивості в головному напрямку розташування волокон, різниця склала більш 29%, однак знизило міцносні характеристики в двох інших напрямках на 6-12%.

Таким чином, застосування вуглецевих нановолокон дозволяє створити якісний наноккомпозит, що має виражені ортотропні властивості.

Таблиця 7

Механічні властивості наноккомпозиту з волокнистими включеннями

Об'ємна частка	0,025	0,05	0,075	0,1	0,125	0,15	0,175	0,2	0,225	0,25
$E_1$ , МПа	10935	18095	25252	32404	39561	46719	53875	61033	68190	75347
$E_2$ , МПа	4228,8	4429,3	4589,9	4739,1	4883,3	5026,3	5169,8	5316,2	5466,5	5621,4
$E_3$ , МПа	4228,8	4429,3	4589,9	4739,1	4883,3	5026,3	5169,8	5316,2	5466,5	5621,4
$G_{12}$ , МПа	1452,3	1506,5	1562,8	1621,4	1682,3	1745,6	1811,5	1880,3	1952,2	2027,5
$G_{23}$ , МПа	1444,9	1492,8	1544,4	1600,6	1660,5	1724,6	1793	1866,6	1945,9	2030,7
$G_{31}$ , МПа	1452,3	1506,5	1562,8	1621,4	1682,3	1745,6	1811,5	1880,3	1952,2	2027,5
$\nu_{12}$	0,3454	0,341	0,3365	0,3328	0,3278	0,3255	0,3193	0,3151	0,3109	0,3068
$\nu_{13}$	0,3454	0,341	0,3365	0,3321	0,3278	0,3235	0,3193	0,3150	0,3109	0,3068
$\nu_{23}$	0,4649	0,490	0,5004	0,5057	0,5089	0,5110	0,512	0,513	0,5146	0,515
Густина	1,176	1,192	1,208	1,224	1,24	1,256	1,272	1,288	1,304	1,32

### Висновки

Створено розрахункові моделі для широкого класу тривимірних наноккомпозитів, які адекватно відображають пружні властивості наноструктур і придатні для ефективного числового моделювання. Отримано замкнуті системи граничних інтегральних рівнянь тривимірних статичних задач щодо поведінки пружних композитів з нанорозмірними неоднорідностями. Отримані моделі забезпечують числове дослідження та ефективне прогнозування механічних властивостей тривимірних матричних наноккомпозитів для повного діапазону параметрів структури. Для опису ефектів на нанорівні прийняті як класична модель, так і модель інтерфейсу Гуртіна-Мердока, яка включає в себе як поверхневий натяг, так і поверхневу жорсткість. Для досягнення високої точності числового аналізу за допомогою розроблених нанорозмірних моделей удосконалено методи граничних та скінченних елементів щодо розгляду неканонічної форми нанорозмірних частинок та некласичних міжфазних умов. У алгоритмах методів граничних та скінченних елементів скінченні системи лінійних алгебраїчних рівнянь відносно міжфазних переміщень та зусиль отримано після спеціальної регуляризації та адаптованої дискретизації граничних інтегральних та варіаційних рівнянь. Запропоновані моделі та алгоритми комп'ютерної симуляції дозволяють проводити числовий аналіз тривимірних статичних задач про поодинокі нановключення різної форми (гранула, волокно, трубка) за класичні та некласичні умови контакту з навколишньою матрицею; тривимірних задач щодо статичної взаємодії скінченної кількості нанорозмірних включень в матриці; дослідження впорядкованих та стохастично розподілених включень; дослідження включень у вигляді сфер, циліндрів, вуглецевих нанотрубок та нановключень у вигляді порожнистих сфер та визначити ефективні пружні параметри тривимірних матричних композитів з нановключеннями, нановолокнами і нанотрубками. Отримані моделі створюють інформативну базу для технологій

синтезування нанокompозитів з вдосконаленими деформаційними і міцнісними характеристиками, зокрема з вираженою анізотропією пружних властивостей.

Проведені дослідження частково фінансуються у рамках програми «Підтримка пріоритетних для держави наукових досліджень і науково-технічних (експериментальних) розробок Відділення фізико-технічних проблем енергетики НАН України" (КПКВК 6541230)».

#### Список використаної літератури

1. Gurtin M. E., Murdoch A. I. A Continuum Theory of Elastic Material Surfaces. *Archive of Rational Mechanics Analysis*. 1975. Vol. 57. P. 291–323.
2. Mykhas'kiv V. V., Stasyuk B. M. Effective Elastic Properties of 3D Composites with Short Curvilinear Fibers: Numerical Simulation and Experimental Validation. *Solid State Phenomena*. 2017. Vol. 258. P. 452–455.
3. Kushch V. I. Stress Field and Effective Elastic Moduli of Periodic Spheroidal Particle Composite with Gurtin-Murdoch Interface. *International Journal of Engineering Science*. 2018. Vol. 132. P. 79–96. DOI: 10.1016/j.ijengsci. 2018.08.00.
4. Gnitko V., Degtyariv K., Karaiev A., Strelnikova E. Multi-Domain Boundary Element Method for Axisymmetric Problems in Potential Theory and Linear Isotropic Elasticity. *WIT Transactions on Engineering Sciences*. 2019. Vol. 122. P. 13–25. DOI: 10.2495/BE410021.
5. Luo J., Wang X. On the anti-Plane Shear of an Elliptic Nanoinhomogeneity. *European Journal of Mechanics. Solids*. 2009. Vol. 28. P. 926–934.
6. Mogilevskaya S. G., Crouch S. L., Stolarski H. K. Multiple Interacting Circular Nanoinhomogeneities with Surface/Interface Effects. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2008. Vol. 56. P. 2298–2327.
7. Tian L., Rajapakse R. K. Elastic Field of an Isotropic Matrix with a Nanoscale Elliptical Inhomogeneity. *International Journal of Solids and Structures*. 2007. Vol. 44. P. 7988–8005.
8. Javili A., Steinmann P. A Finite Element Framework for Continua with Boundary Energies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2010. Vol. 199. P. 755–765.
9. Dong C. Y., Pan E. Boundary Element Analysis of Nanoinhomogeneities of Arbitrary Shapes with Surface and Interface Effects. *Engineering Analysis with Boundary Elements*. 2011. Vol. 35. P. 996–1002.
10. Bakr Adib A. The Boundary Integral Equation Method in Axisymmetric Stress Analysis Problems. Springer Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo, 1986. 213 p.
11. Balas J., Sladek J., Sladek V. Stress Analysis by Boundary Elements. *Studies in Applied Mechanics*. Elsevier, 1989. Vol. 23.
12. Karaiev A., Strelnikova E. Singular Integrals in Axisymmetric Problems of Elastostatics. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*. 2019. Vol. 122. P. 13–25. DOI.org/10.1142/S1793962320500038
13. Караєв А. О., Стрельникова О. О. Сингулярні інтеграли в аксіально-симетричних задачах теорії потенціалу. *Прикладні питання математичного моделювання*. 2018. № 1. С. 10–18.
14. Еселева Е. В., Гнитько В. И., Стрельникова Е. А. Собственные колебания сосудов высокого давления при взаимодействии с жидкостью. *Проблемы машиностроения*. 2006. №1. С.105–118.
15. Gnitko V., Naumemko Y., Strelnikova E. Low Frequency Sloshing Analysis of Cylindrical Containers with Flat and Conical Baffles. *International Journal of Applied*



- Mechanics and Engineering*. 2017. Vol. 22. Issue 4. P. 867–881.
16. Дегтярьов К. Г., Гнітько В. І., Стрельнікова О. О., Тонконоженко А. М. Розрахункові моделі на основі методів скінчених та граничних методів для аналізу механічних властивостей тривимірних нанокомпозитів. *Прикладні питання математичного моделювання*. 2018. № 2. С. 43–54. DOI: <https://doi.org/10.32782/2618-0340-2018-2-43-54>
  17. Le M.-T., Huang S.-C. Modeling and Estimating the Effective Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites by Finite Element Method. *Journal of Engineering Technology and Education*. 2014. Vol. 11. № 2. P. 145–158.
  18. Miller R. E., Shenoy V. B. Size-Dependent Elastic Properties of Nanosized Structural Elements. *Nanotechnology*. 2000. Vol. 11. P. 139–147.
  19. Gao W., Yu S. W., Huang G. Y. Finite Element Characterization of the Size Dependent Mechanical Behavior in Nanosystems. *Nanotechnology*. 2006. Vol. 17. P. 1118–1122.

### References

1. Gurtin, M. E., & Murdoch, A. I. (1975). A Continuum Theory of Elastic Material Surfaces. *Archive of Rational Mechanics Analysis*. **57**, 291–323.
2. Mykhas'kiv, V. V., & Stasyuk, B. M. (2017). Effective Elastic Properties of 3D Composites with Short Curvilinear Fibers: Numerical Simulation and Experimental Validation. *Solid State Phenomena*. **258**, 452–455.
3. Kushch, V. I. (2018). Stress Field and Effective Elastic Moduli of Periodic Spheroidal Particle Composite with Gurtin-Murdoch Interface. *International Journal of Engineering Science*. **132**, 79–96. DOI: 10.1016 /j.ijengsci. 2018.08.00.
4. Gnitko, V., Degtyariov, K., Karaiev, A., & Strelnikova, E. (2019). Multi-Domain Boundary Element Method for Axisymmetric Problems in Potential Theory and Linear Isotropic Elasticity. *WIT Transactions on Engineering Sciences*. **122**, 13–25. DOI: 10.2495/BE410021.
5. Luo, J., & Wang, X. (2009). On the anti-Plane Shear of an Elliptic Nanoinhomogeneity. *European Journal of Mechanics. Solids*. **28**, 926–934.
6. Mogilevskaya, S. G., Crouch, S. L., & Stolarski, H. K. (2008). Multiple Interacting Circular Nanoinhomogeneities with Surface/Interface Effects. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. **56**, 2298–2327.
7. Tian, L., & Rajapakse, R. K. (2007). Elastic Field of an Isotropic Matrix with a Nanoscale Elliptical Inhomogeneity. *International Journal of Solids and Structures*. **44**, 7988–8005.
8. Javili, A., & Steinmann, P. (2010). A Finite Element Framework for Continua with Boundary Energies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. **199**, 755–765.
9. Dong, C. Y., & Pan, E. (2011). Boundary Element Analysis of Nanoinhomogeneities of Arbitrary Shapes with Surface and Interface Effects. *Engineering Analysis with Boundary Elements*. **35**, 996–1002.
10. Bakr, Adib A. (1986). The Boundary Integral Equation Method in Axisymmetric Stress Analysis Problems. Springer Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo.
11. Balas, J., Sladek, J., & Sladek, V. (1989). Stress Analysis by Boundary Elements. *Studies in Applied Mechanics*. Vol. 23.
12. Karaiev, A., & Strelnikova, E. (2019). Singular Integrals in Axisymmetric Problems of Elastostatics. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*. **122**, 13–25. DOI.org/10.1142/S1793962320500038
13. Karaiev, A. O., & Strelnikova, O. O. (2018). Synhuliarni intehraly v aksialno-

- symetrychnykh zadachakh teorii potentsialu. *Prykladni pytannia matematychnoho modeliuвання*. **1**, 10–18.
14. Eseleva, E. V., Gnitko, V. I., & Strelnikova, E. A. (2006). Sobstvennyie kolebaniya sosudov vyisokogo davleniya pri vzaimodeystvii s zhidkostyu. *Problemyi mashinostroeniya*. **1**, 105–118.
  15. Gnitko, V., Naumemko, Y., & Strelnikova, E. (2017). Low Frequency Sloshing Analysis of Cylindrical Containers with Flat and Conical Baffles. *International Journal of Applied Mechanics and Engineering*. **22**, 4, 867–881.
  16. Dehtiarov, K. H., Hnitko, V. I., & Strelnikova, O. O., Tonkonozhenko A. M. (2018). Rozrakhunkovi modeli na osnovi metodiv skinchenykh ta hranychnykh metodiv dlia analizu mekhanichnykh vlastyvostei tryvymirnykh nanokompozytiv. *Prykladni pytannia matematychnoho modeliuвання*. **2**, 43–54. DOI: <https://doi.org/10.32782/2618-0340-2018-2-43-54>
  17. Le, M.-T., & Huang, S.-C. (2014). Modeling and Estimating the Effective Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites by Finite Element Method. *Journal of Engineering Technology and Education*. **11**, 2, 145–158.
  18. Miller, R. E., & Shenoy, V. B. (2000). Size-Dependent Elastic Properties of Nanosized Structural Elements. *Nanotechnology*. **11**, 139–147.
  19. Gao, W., Yu, S. W., & Huang, G. Y. (2006). Finite Element Characterization of the Size Dependent Mechanical Behavior in Nanosystems. *Nanotechnology*. **17**, 1118–1122.