

Научная статья

УДК 51-72, 51-74, 539.411, 539.412

doi: 10.17223/19988621/80/7

Оценка локальных механических свойств керамических огнеупоров на основе SiO_2 с помощью микромасштабного моделирования

Александр Сергеевич Григорьев¹, Андрей Иванович Дмитриев²,
Евгений Викторович Шилько³

^{1, 2, 3} *Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН,
Томск, Россия*

^{2, 3} *Томский государственный университет, Томск, Россия*

¹ *grigoriev@ispms.ru*

² *dmitr@ispms.ru*

³ *shilko@ispms.ru*

Аннотация. Работа посвящена численному изучению локальных механических свойств пористых керамических (на основе SiO_2) огнеупоров на микроскопическом структурном уровне. С использованием разработанной дискретно-элементной модели проведена оценка упругих и прочностных характеристик микромасштабных пористых образцов огнеупора в зависимости от величины пористости и морфологии порового пространства. Показано, что определяющий вклад в механические свойства огнеупора вносит пористость закрытого типа, хотя объемное содержание таких пор невелико в сравнении с содержанием протяженных пор канального типа.

Ключевые слова: огнеупоры на основе SiO_2 , пористость, прочность, численное моделирование, дискретные элементы

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00688, <https://rscf.ru/project/22-19-00688>.

Для цитирования: Григорьев А.С., Дмитриев А.И., Шилько Е.В. Оценка локальных механических свойств керамических огнеупоров на основе SiO_2 с помощью микромасштабного моделирования // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2022. № 80. С. 73–84. doi: 10.17223/19988621/80/7

Evaluation of local mechanical properties of SiO₂-based ceramic refractories using microscale modeling

Aleksandr S. Grigoriev¹, Andrey I. Dmitriev², Evgeniy V. Shil'ko³

^{1, 2, 3} *Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation*

^{2, 3} *Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation*

¹ *grigoriev@ispms.ru*

² *dmitr@ispms.ru*

³ *shilko@ispms.ru*

Abstract. The development of multiscale mechanical models of promising refractory materials is an urgent problem in the mechanics of solids. One of the reasons is the applicability of these models when creating digital twins of advanced refractories. The authors of this paper recently developed and validated a mesoscopic model of the SiO₂-based refractory material that is widely used in metallurgy. This model takes into account the characteristic structural features of SiO₂ refractory in the scale range of 10⁻⁵ – 10⁻² m and the mechanical behavior features in a wide range of strain rates. However, the full use of the model requires knowledge of local mechanical properties of mesoscopic structural elements, in particular, the highly porous regions, which are formed by fine grains less than 10² μm in size. An experimental study of effective mechanical characteristics of such regions is an extremely difficult task. Therefore, the purpose of this work is to obtain the theoretical estimate using the microscale numerical simulation of highly porous regions of SiO₂ refractory material and to determine their integral mechanical characteristics. To study this problem, the two-dimensional model samples are developed that simulate fine-grained regions of the refractory and are characterized by different porosity and pore structure types (channel-like or closed type). The intervals of the variation of Young's modulus and strength characteristics of the samples are obtained depending on the porosity and morphology of the pore space. The contribution of the closed-type porosity to the integral mechanical characteristics of the refractory is determined; though, the volume fraction of such pores is low as compared to that of the channel-like pores. The obtained data will be used as input parameters of mesoscale refractory models for solving the urgent problems related to the study of the effect of microstructure parameters on the macroscopic mechanical and thermomechanical properties of SiO₂-based refractories.

Keywords: SiO₂-based refractory materials, porosity, strength, numerical modeling, discrete element method

Acknowledgments: This study was funded by the Russian Science Foundation (project No. 22-19-00688, <https://rscf.ru/project/22-19-00688>).

For citation: Grigoriev, A.S., Dmitriev, A.I., Shil'ko, E.V. (2022) Evaluation of local mechanical properties of SiO₂-based ceramic refractories using microscale modeling. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 80. pp. 73–84. doi: 10.17223/19988621/80/7

Введение

Изучение свойств и дизайн структуры являются одним из наиболее востребованных направлений в механике гетерогенных материалов. Ярким представителем класса гетерогенных материалов, характеризующимся многомасштабной структурой и широко применяемым в металлургии в качестве материала для футеровок теплозащитных элементов коксовых батарей и теплообменников доменных печей, является керамический огнеупор на основе SiO_2 [1, 2]. Такие огнеупоры производятся путем спекания частиц диоксида кремния, гранулометрический состав которых характеризуется наличием множества различных по размеру фракций (от нескольких микрометров до нескольких миллиметров) [3]. Спеченные образцы характеризуются относительно высокой пористостью (среднее значение превышает 20%), при этом локальные значения пористости могут превышать 60%. Важно отметить также значительное различие пор по размерам и форме, что является следствием широкого спектра размеров зерен SiO_2 . Сложность и многомасштабность структуры огнеупоров на основе SiO_2 определяет большое внимание исследователей к мезо- и микроструктурным аспектам их механического отклика и разрушения [2, 4], что связано, в частности, с решением задач оптимального дизайна внутренней структуры для достижения требуемых макроскопических свойств.

Помимо классического материаловедческого анализа, эффективным подходом к изучению закономерностей и особенностей разрушения огнеупоров является компьютерное моделирование. В последнее десятилетие развито большое количество мезомасштабных механических моделей огнеупорных материалов. Они, как правило, базируются на представлении многомасштабной структуры как композита с явным учетом крупных фракций частиц (и мезоскопических пор) и эффективным учетом мелких фракций и микромасштабных несплошностей на основе процедур гомогенизации [5–9]. Одним из ключевых вопросов при создании таких моделей является определение локальных свойств компонентов. Ввиду хорошо известных сложностей их экспериментального определения предложены различные алгоритмы «калибровки» локальных механических характеристик в мезомасштабных моделях [5, 9–12].

Несмотря на большой объем экспериментальных исследований огнеупоров на основе SiO_2 , до последнего времени компьютерное моделирование их поведения осуществлялось с применением макроскопических моделей. Недавно авторами данной работы была предложена оригинальная мезоскопическая модель огнеупора на основе SiO_2 [13]. Модель учитывает его характерные структурные особенности в интервале масштабов 10^{-5} – 10^{-2} м и механические характеристики мезомасштабных элементов структуры. В развитой мезоскопической модели материал представляется в виде дисперсно-упрочненного композиционного материала, состоящего из «мягкой» матрицы и «жестких» дисперсных включений. В качестве матрицы условно выделяется высокопористая часть материала, состоящая из мелкодисперсных зерен и связывающая крупные зерна SiO_2 размером более 10^{-4} м (включения). Микромасштабные поры в матрице учитываются неявно. Соответственно, эффективные (мезоскопические) механические характеристики матрицы должны учитывать ее пористую микроструктуру и квазихрупкий характер разрушения, связанный со способностью аккумулировать микроповреждения, возникающие при механических и термических воздействиях.

Актуальность развитой мезоскопической модели определяется перспективами ее использования для оценки прочностных характеристик и энергии разрушения огнеупора в сложных условиях нагружения, решения задач оптимизации внутренней структуры для конкретных условий эксплуатации, а также для разработки цифровых двойников применяемых в настоящее время и перспективных огнеупорных материалов. В то же время применение такой модели требует знания локальных механических свойств мезоскопических структурных элементов, в частности эффективных механических характеристик матрицы. Экспериментальное определение эффективных характеристик матрицы – крайне затруднительная задача ввиду малых линейных размеров этих областей. Привлекательной альтернативой является теоретическая оценка этих свойств, получаемая на основе прямого микромасштабного численного моделирования поровой структуры матрицы огнеупора и анализа интегральных механических характеристик.

Ключевыми параметрами пористой структуры, определяющими параметры механического отклика матрицы, являются величина пористости и морфология порового пространства. Локальные значения пористости мезоскопических областей матрицы могут варьировать в интервале десятков процентов (при характерном среднем значении около 50%). Кроме того, может различаться и морфология порового пространства различных мезоскопических областей.

Сказанное определило цель настоящей работы – численное изучение зависимости основных механических характеристик матрицы огнеупора на основе SiO_2 (прочности при сжатии / растяжении и упругого модуля) от величины пористости и особенностей структуры порового пространства. Исследования проводились с использованием численного метода однородно-деформируемых дискретных элементов. В рамках этого метода материал представляется набором связанных дискретных элементов. При описании напряженно-деформированного состояния элемента используется приближение однородного распределения всех компонентов тензоров напряжений и деформаций в его объеме. Локальное разрушение материала моделируется разрывом межэлементных связей согласно заданному критерию. В настоящей работе использовался критерий разрушения в форме Друкера–Прагера, дополненный критерием Ранкина. Детали метода и применяемой модели локально изотропных хрупких материалов приведены в работах авторов [13, 14].

Постановка задачи

В работе моделировались 2D образцы, моделирующие области пористой матрицы с различными характеристиками порового пространства. Пористая структура матрицы задавалась явным образом путем удаления дискретных элементов из образцов. Рассматривалась пористость двух типов: «закрытая» и «канальная» (рис. 1). Закрытый тип пористости задавался набором случайно расположенных круглых пор, каждая из которых изолирована от соседних пор стенкой из дискретных элементов. Минимальный размер поры был равен размеру дискретного элемента (3.5 мкм). Модельные образцы с закрытой пористостью характеризовались различными значениями ширины интервала распределения пор по размерам в зависимости от величины пористости: при значениях пористости 10% и 20% задавались моноразмерные поры; при пористости 30% размеры пор различались

в пределах трех раз; при пористости 40% – в пределах 6 раз; при пористости 50% – в пределах 8 раз; при пористости 60% – в пределах 10 раз. Во всех случаях использовалось равномерное распределение закрытых пор по размерам. Пористость канального типа задавалась ансамблем случайно размещенных круглых пор диаметром 3.5 мкм. При этом допускалось перекрытие двух и более пор, что позволяло реализовать нерегулярную канальную структуру и дисперсию размеров каналов. Отметим, что оба типа пористости (округлые и канальные поры) реализуются в матрице реальных элементов футеровок из SiO_2 , получаемых промышленным способом. Более того, характерные размеры пор и их распределение по размерам в модельных образцах также качественно соответствовали тем же в реальных образцах. Значение пористости модельных образцов варьировало в пределах от 10 до 60%.

Материал стенок пор полагался упруго-хрупким с механическими характеристиками, соответствующими характеристикам макроскопических беспористых образцов SiO_2 (модуль Юнга $E = 65$ ГПа, предел прочности на сжатие $\sigma_c = 680$ МПа, предел прочности на растяжение $\sigma_t = 68$ МПа).

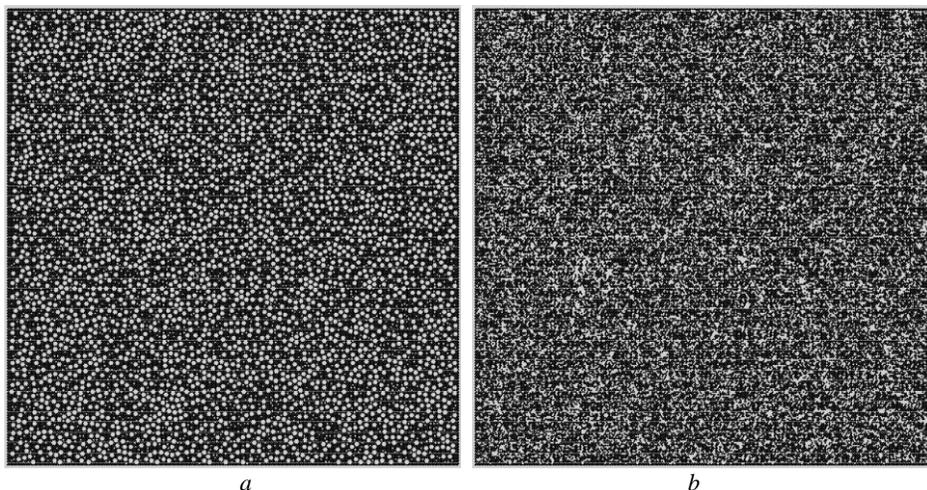


Рис. 1. Примеры структуры образцов модельного материала (пористость 30%):
a – закрытая структура пор; *b* – канальная структура пор

Fig. 1. Typical structure of model samples (30% porosity): (*a*) closed pores
and (*b*) channel-like pores

Моделировались испытания на одноосное сжатие и растяжение двумерных пористых образцов в приближении плосконапряженного состояния. Нагружение осуществлялось путем задания элементам верхних и нижних поверхностей образца постоянной скорости. Величина скорости выбиралась достаточно малой, чтобы обеспечить квазистатический режим нагружения. Регистрировались величина предела прочности (предельное напряжение на диаграмме нагружения) и наклон начальной стадии диаграммы нагружения (модуль упругости). Анализируются зависимости модуля Юнга и пределов прочности пористых образцов SiO_2 на сжатие и растяжение от величины и типа пористости.

Результаты

Известно, что величина упругих модулей пористого образца существенно ниже соответствующих значений упругих модулей бездефектного материала. В частности, для диоксид-циркониевой керамики, которая характеризуется наличием округлых пор различного размера, известна типичная зависимость модуля Юнга от величины пористости [15]. Анализ данной зависимости показал, что, будучи представленной в безразмерном виде нормировкой на модуль Юнга беспористого материала, она близка к аналогичным зависимостям для многих технических и природных пористых материалов (включая огнеупорные керамики) [16, 17]. Поэтому в настоящей работе данная зависимость использовалась для верификации построенной структурно-механической модели матрицы огнеупора.

Результаты моделирования показали, что нормированный модуль Юнга, полученный путем численного моделирования испытаний на сжатие модельных образцов пористой матрицы огнеупора с закрытым типом пористости (см. рис. 1, а), показывает хорошее согласие с экспериментальными данными для диоксид-циркониевой керамики (рис. 2). В случае закрытой структуры пор зависимость для модельных образцов практически совпадает с экспериментальной. Данный факт указывает на то, что построенные образцы матрицы огнеупора являются представительными, а модель матрицы огнеупора адекватно описывает механический отклик материала в условиях механического нагружения.

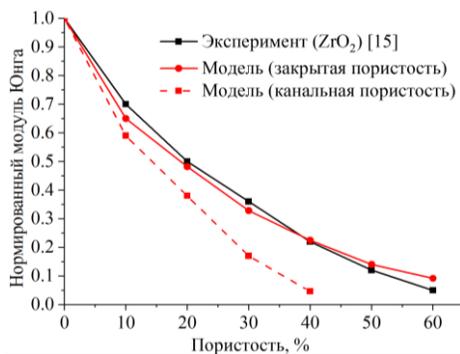


Рис. 2. Зависимости нормированного модуля Юнга матрицы огнеупора на основе SiO₂ от величины пористости

Fig. 2. Dependences of the normalized Young's modulus of SiO₂-based refractory matrix on the porosity

В то же время зависимость для канальной структуры пор имеет существенно более крутой наклон (см. рис. 2). Так, уже при значении пористости 40% и выше модуль Юнга образцов с канальным типом пористости снижается на 2 порядка величины. Это качественно согласуется с известными данными о пористых материалах, канальная поровая структура которых может быть аппроксимирована моделью перекрывающихся сфер [17].

Сопоставление полученных зависимостей с доступными экспериментальными *in situ* оценками для огнеупора на основе SiO₂ позволяет сделать вывод о преобладании в матрице огнеупора канальной пористости при одновременном содержании и пористости закрытого типа, что повышает жесткость несущего каркаса.

При этом существенная доля пористости канального типа обеспечивает достаточно низкие значения интегрального модуля упругости матрицы. Полученные зависимости также определяют характерные интервалы вариации локальных значений упругих модулей матрицы огнеупора при различных значениях локальной пористости. Полученные интервалы могут быть использованы для задания стохастического распределения локальных упругих модулей матрицы в мезоскопических представительных объемах огнеупора.

Помимо интегральной жесткости, параметры пористости в значительной степени влияют и на прочностные характеристики матрицы огнеупора, такие как значения прочности при одноосном сжатии, растяжении, изгибе и сдвиге. В настоящей работе рассмотрено влияние структуры пор и величины пористости на величину прочности модельного пористого материала при одноосном сжатии и растяжении (данные характеристики используются в мезоскопической модели огнеупора в качестве параметров критерия локального разрушения матрицы). На рис. 3, *a* представлены зависимости предела прочности на сжатие модельных образцов от величины пористости в случае округлых пор закрытого типа. Пределы прочности образцов в данном случае представлены в безразмерном виде, полученном путем нормирования на величину прочности на сжатие макроскопического беспористого образца SiO_2 . Следует отметить, что напряженно-деформированное состояние пористых образцов в условиях одноосного сжатия является сложным. В частности, различные области материала в окрестностях пор могут находиться в условиях локального растяжения, растяжения и сдвига, сжатия, сжатия и сдвига. Поэтому интегральная прочность пористых образцов определяется не только величиной прочности на сжатие материала стенок пор (σ_c), но и значением их прочности на растяжение (σ_t). Известно, что величина локальной прочности зерен на растяжение может многократно превышать аналогичное значение для макроскопических беспористых образцов. Непосредственное экспериментальное определение параметра σ_t для микромасштабных зерен является крайне затруднительным. Поэтому в работе параметр σ_t рассматривался как варьируемый в интервале от 68 МПа (макроскопическое значение) до 680 МПа (физически обоснованный верхний предел, равный величине прочности на сжатие). Приведенные на рис. 3 расчетные зависимости получены для различных значений отношения σ_c/σ_t .

Как видно из рис. 3, *a*, зависимость предела прочности от пористости является убывающей функцией, близкой к экспоненциальной. При этом уменьшение отношения прочностей стенок беспористого каркаса на сжатие и растяжение (σ_c/σ_t) сопровождается увеличением прочности образца на сжатие. Это свидетельствует о том, что локальные повреждения в пористых образцах формируются как по механизму сдвига, так и по механизму отрыва. Экспериментальные данные для диоксид-циркониевой керамики и огнеупорного материала, представленные на рисунке, хорошо соответствуют результатам численных исследований при $\sigma_c/\sigma_t < 3$. Это свидетельствует о том, что при задании механических характеристик стенок каркаса пористой структуры адекватным является приближение низкодефектного материала (дефекты, по-видимому, сконцентрированы на межзеренных интерфейсах), характеризующегося достаточно близкими значениями прочности при сжатии и растяжении. Отметим также, что зависимость нормированной прочности образцов на растяжение от пористости показывает крайне слабую чувствительность к отношению σ_c/σ_t для материала стенок пор (рис. 3, *b*). Это свидетель-

ствует о преобладании локального разрушения по механизму отрыва. Видимое на рис. 3, *b* значимое различие экспериментальных и расчетных данных, по-видимому, связано с тем, что экспериментальные оценки прочности образцов на разрыв производятся на основе испытаний на трехточечный изгиб, в которых вид напряженного состояния образца существенно отличается от состояния образца при истинном одноосном растяжении.

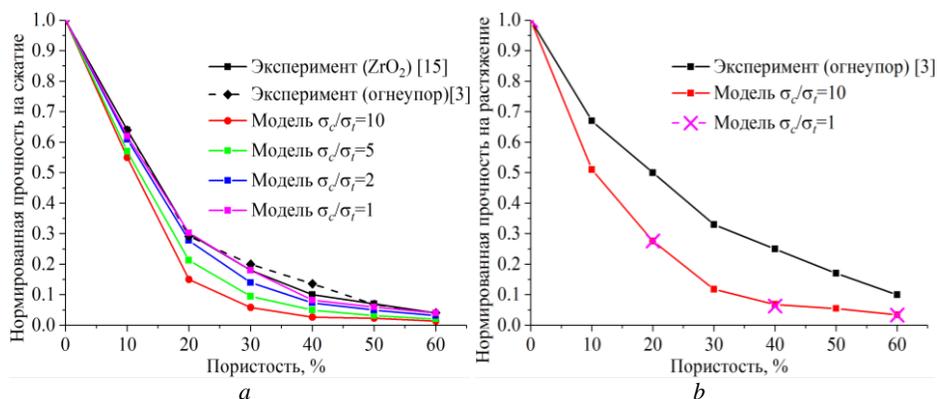


Рис. 3. Зависимости нормированного предела прочности образцов с порами закрытого типа от величины пористости: *a* – при сжатии; *b* – при растяжении
Fig. 3. Dependences of the normalized strength of the samples with closed pores on the porosity: under (a) compression and (b) tension

Характеризуя разрушение пористых образцов, отметим, что в интервале значений пористости от 10 до 30% разрушение образцов является хрупким, а по мере дальнейшего увеличения пористости характер разрушения постепенно трансформируется в квазихрупкий, связанный с формированием крупных внутренних трещин и их постепенным ростом и образованием магистральных трещин.

В случае пористости канального типа значения прочности образцов существенно ниже экспериментальных значений прочности макроскопических керамических образцов и прочности модельных образцов с закрытым типом пористости. На рис. 4 приведены зависимости нормированного предела прочности от величины пористости модельных образцов с порами канального типа при сжатии и растяжении. Можно видеть, в частности, что уже при пористости 40% прочность образцов на сжатие составляет около 1% величины прочности на сжатие материала стенок пор, а при растяжении – около 2% прочности стенок на растяжение. Данный эффект связан с тем, что канальная структура пор не обеспечивает достаточного количества стенок каркаса, на которые распределяется приложенная нагрузка. Увеличение количества таких стенок за счет частичной замены канальных пор замкнутыми позволяет повысить локальную прочность матрицы.

Важной составляющей численных исследований является анализ сходимости результатов моделирования, а именно влияния размера дискретного элемента на величину эффективных механических характеристик образцов. Для проведения такого анализа были рассмотрены модельные образцы, состоящие из дискретных элементов, диаметр которых в 3 и 9 раз меньше исходного значения 3.5 мкм. При этом размеры и расположение пор оставались неизменными.

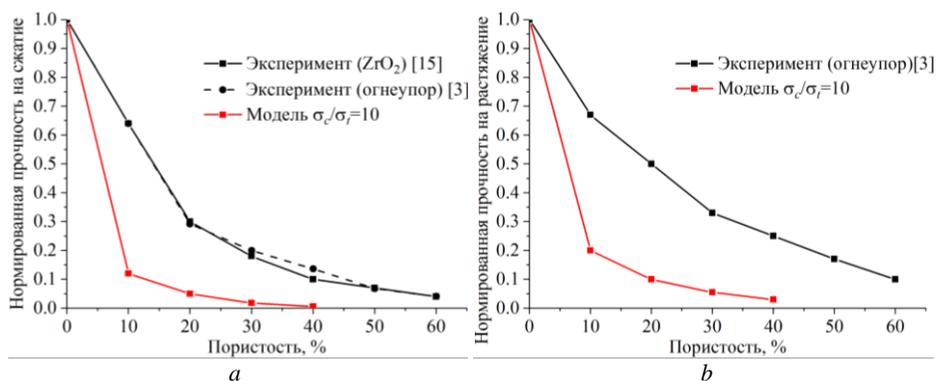


Рис. 4. Зависимости нормированного предела прочности образцов с порами канального типа от величины пористости: *a* – при сжатии; *b* – при растяжении
Fig. 4. Dependences of the normalized strength of the samples with channel-like pores on the porosity: under (*a*) compression and (*b*) tension

Результаты контрольных расчетов для нескольких значений пористости и отношения σ_c/σ_t показали, что уменьшение размера дискретных элементов приводит к незначительным изменениям эффективного модуля Юнга (менее 3%) и предела прочности (менее 5%). Таким образом, выбранный диаметр дискретного элемента (3.5 мкм) обеспечивает достаточную точность оценок эффективных свойств представительного объема матрицы огнеупора.

Заключение

Результаты численного моделирования показали, что развитая двумерная микромасштабная модель мезоскопического структурного элемента огнеупорного материала на основе SiO₂ (высокопористые области материала, связывающие крупные зерна) позволяет адекватно описывать механическое поведение данного ключевого элемента мезоструктуры и оценивать его локальные механические характеристики. Получены зависимости модуля Юнга и значений прочности на сжатие и растяжение таких высокопористых областей от величины и типа локальной пористости. Ключевым результатом исследования является вывод об определяющем вкладе закрытой пористости, образованной одиночными округлыми порами, в механические свойства огнеупора на основе SiO₂, хотя объемное содержание таких пор невелико в сравнении с протяженными порами канального типа. Полученные данные актуальны для развития двухмасштабных (микро-мезомасштабных) моделей огнеупорных керамических материалов с целью дизайна внутренней структуры для достижения требуемых макроскопических механических характеристик.

Список источников

1. Schacht C. Refractory Linings: Thermomechanical Design and Applications. Boca Raton, FL : CRC Press, 2019. 504 p.
2. Andreev K., Tadaion V., Zhu Q., Wang W., Yin Y., Tonnesen T. Thermal and mechanical cyclic tests and fracture mechanics parameters as indicators of thermal shock resistance – case

- study on silica refractories // J. Eur. Cer. Soc. 2019. V. 39. P. 1650–1659. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2018.12.062
3. Кащеев И.Д., Стрелов К.К., Мамыкин П.С. Химическая технология огнеупоров. М. : Интернет Инжиниринг, 2007. 748 с.
 4. Andreev K., Yin Y., Luchini B., Sabirov I. Failure of refractory masonry material under monotonic and cyclic loading – Crack propagation analysis // Constr. Build. Mater. 2021. V. 299. Art. 124203. doi: 10.1016/j.conbuildmat.2021.124203
 5. Özdemir I., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Modeling thermal shock damage in refractory materials via direct numerical simulation (DNS) // J. Eur. Ceram. Soc. 2010. V. 30. P. 1585–1597. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2009.12.014
 6. Šavija B., Smith G.E., Liu D., Schlangen E., Flewitt P.E.J. Modelling of deformation and fracture for a model quasi-brittle material with controlled porosity: Synthetic versus real microstructure // Eng. Fract. Mech. 2019. V. 205. P. 399–417. doi: 10.1016/j.engfracmech.2018.11.008
 7. Andre D., Levraut B., Tessier-Doyen N., Huger M. A discrete element thermo-mechanical modelling of diffuse damage induced by thermal expansion mismatch of two-phase materials // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2017. V. 318. P. 898–916. doi: 10.1016/j.cma.2017.01.029
 8. Andreev K., Verstrynghe E., Wevers M. Compaction and shear failure of refractory mortars – effects of porosity and binder hardening // J. Eur. Ceram. Soc. 2017. V. 37. P. 841–848. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2016.08.040
 9. Makarian K., Santhanam S. Micromechanical modeling of thermo-mechanical properties of high volume fraction particle-reinforced refractory composites using 3D Finite Element analysis // Ceram. Int. 2020. V. 46. P. 4381–4393. doi: 10.1016/j.ceramint.2019.10.162
 10. Henneberg D., Ricoeur A., Judt P. Multiscale modeling for the simulation of damage processes at refractory materials under thermal shock // Comput. Mater. Sci. 2013. V. 70. P. 187–195. doi: 10.1016/j.commatsci.2013.01.002
 11. Nguyen T.T., André D., Huger M. Analytical laws for direct calibration of discrete element modelling of brittle elastic media using cohesive beam model // Comput. Part. Mech. 2019. V. 6. P. 393–409. doi: 10.1007/s40571-018-00221-0
 12. Moreira M.H., Cunha T.M., Campos M.G.G., Santos M.F., Santos Jr. T., Andre D., Pandolfelli V.C. Discrete element modeling – A promising method for refractory microstructure design // Am. Ceram. Soc. Bull. 2020. V. 99 (2). P. 22–28.
 13. Grigoriev A.S., Zabolotskiy A.V., Shilko E.V., Dmitriev A.I., Andreev K. Analysis of the Quasi-Static and Dynamic Fracture of the Silica Refractory Using the Mesoscale Discrete Element Modelling // Materials. 2021. V. 14. Art. 7376. doi: 10.3390/ma14237376
 14. Psakhie S.G., Shilko E.V., Grigoriev A.S., Astafurov S.V., Dimaki A.V., Smolin A.Yu. A mathematical model of particle–particle interaction for discrete element based modeling of deformation and fracture of heterogeneous elastic–plastic materials // Eng. Fract. Mech. 2014. V. 130. P. 96–115. doi: 10.1016/j.engfracmech.2014.04.034
 15. Smolin A.Yu., Roman N.V., Konovalenko I.S., Eremina G.M., Buyakova S.P., Psakhie S.G. 3D simulation of dependence of mechanical properties of porous ceramics on porosity // Eng. Fract. Mech. 2014. V. 130. P. 53–64. doi: 10.1016/j.engfracmech.2014.04.001
 16. Pubst W., Uhlirova T., Gregorova E., Wiegmann A. Young’s modulus and thermal conductivity of model materials with convex or concave pores – from analytical predictions to numerical results // J. Eur. Cer. Soc. 2018. V. 38. P. 2694–2707. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2018.01.040
 17. Roberts A.P., Garboczi E.J. Elastic properties of model porous ceramics // J. Am. Ceram. Soc. 2000. V. 83. P. 3041–3048. doi: 10.1111/j.1151-2916.2000.tb01680.x

References

1. Schacht C. (2019) *Refractory Linings: Thermomechanical Design and Applications*. Boca Raton: CRC Press.

2. Andreev K., Tadaion V., Zhu Q., Wang W., Yin Y., Tonnesen T. (2019) Thermal and mechanical cyclic tests and fracture mechanics parameters as indicators of thermal shock resistance – case study on silica refractories. *Journal of the European Ceramic Society*. 39. pp. 1650–1659. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2018.12.062
3. Kashcheev I.D., Strelov K.K., Mamykin P.S. (2007) *Khimicheskaya tekhnologiya ogneuporov* [Chemical technology of refractories]. Moscow: IntermetInzhiniring.
4. Andreev K., Yin Y., Luchini B., Sabirov I. (2021) Failure of refractory masonry material under monotonic and cyclic loading – Crack propagation analysis. *Construction and Building Materials*. 299. Article 124203. doi: 10.1016/j.conbuildmat.2021.124203
5. Özdemir I., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. (2010) Modeling thermal shock damage in refractory materials via direct numerical simulation (DNS). *Journal of the European Ceramic Society*. 30. pp. 1585–1597. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2009.12.014
6. Šavija B., Smith G.E., Liu D., Schlangen E., Flewitt P.E.J. (2019) Modelling of deformation and fracture for a model quasi-brittle material with controlled porosity: Synthetic versus real microstructure. *Engineering Fracture Mechanics*. 205. pp. 399–417. doi: 10.1016/j.engfracmech.2018.11.008
7. Andre D., Levraut B., Tessier-Doyen N., Huger M. (2017) A discrete element thermo-mechanical modelling of diffuse damage induced by thermal expansion mismatch of two-phase materials. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*. 318. pp. 898–916. doi: 10.1016/j.cma.2017.01.029
8. Andreev K., Verstryngte E., Wevers M. (2017) Compaction and shear failure of refractory mortars – effects of porosity and binder hardening. *Journal of the European Ceramic Society*. 37. pp. 841–848. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2016.08.040
9. Makarian K., Santhanam S. (2020) Micromechanical modeling of thermo-mechanical properties of high volume fraction particle-reinforced refractory composites using 3D Finite Element analysis. *Ceramics International*. 46. pp. 4381–4393. doi: 10.1016/j.ceramint.2019.10.162
10. Henneberg D., Ricoeur A., Judt P. (2013) Multiscale modeling for the simulation of damage processes at refractory materials under thermal shock. *Computational Material Science*. 70. pp. 187–195. doi: 10.1016/j.commatsci.2013.01.002
11. Nguyen T.T., André D., Huger M. (2019) Analytical laws for direct calibration of discrete element modelling of brittle elastic media using cohesive beam model. *Computational Particle Mechanics*. 6. pp. 393–409. doi: 10.1007/s40571-018-00221-0
12. Moreira M.H., Cunha T.M., Campos M.G.G., Santos M.F., Santos Jr.T., Andre D., Pandolfelli V.C. (2020) Discrete element modeling – A promising method for refractory microstructure design. *American Ceramic Society Bulletin*. 99(2). pp. 22–28.
13. Grigoriev A.S., Zabolotskiy A.V., Shilko E.V., Dmitriev A.I., Andreev K. (2021) Analysis of the quasi-static and dynamic fracture of the silica refractory using the mesoscale discrete element modeling. *Materials*. 14. Article 7376. doi: 10.3390/ma14237376
14. Psakhie S.G., Shilko E.V., Grigoriev A.S., Astafurov S.V., Dimaki A.V., Smolin A.Yu. (2014) A mathematical model of particle–particle interaction for discrete element based modeling of deformation and fracture of heterogeneous elastic–plastic materials. *Engineering Fracture Mechanics*. 130. pp. 96–115. doi: 10.1016/j.engfracmech.2014.04.034
15. Smolin A.Yu., Roman N.V., Konovalenko I.S., Eremina G.M., Buyakova S.P., Psakhie S.G. (2014) 3D simulation of dependence of mechanical properties of porous ceramics on porosity. *Engineering Fracture Mechanics*. 130. pp. 53–64. doi: 10.1016/j.engfracmech.2014.04.001
16. Pubst W., Uhlirova T., Gregorova E., Wiegmann A. (2018) Young's modulus and thermal conductivity of model materials with convex or concave pores – from analytical predictions to numerical results. *Journal of the European Ceramic Society*. 38. pp. 2694–2707. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2018.01.040
17. Roberts A.P., Garboczi E.J. (2000) Elastic properties of model porous ceramics. *Journal of the American Ceramic Society*. 83. pp. 3041–3048. doi: 10.1111/j.1151-2916.2000.tb01680.x

Сведения об авторах:

Григорьев Александр Сергеевич – младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, Томск, Россия. E-mail: grigoriev@ispms.ru

Дмитриев Андрей Иванович – доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, профессор кафедры физики металлов физического факультета Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: dmitr@ispms.ru

Шилько Евгений Викторович – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, профессор кафедры физики металлов физического факультета Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: shilko@ispms.ru

Information about the authors:

Grigoriev Aleksandr S. (Junior Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation). E-mail: grigoriev@ispms.ru

Dmitriev Andrey I. (Doctor of Physics and Mathematics, Principal Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: dmitr@ispms.ru

Shil'ko Evgeniy V. (Doctor of Physics and Mathematics, Principal Researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: shilko@ispms.ru

Статья поступила в редакцию 01.06.2022; принята к публикации 01.12.2022

The article was submitted 01.06.2022; accepted for publication 01.12.2022