

Структурный подход к многомасштабному моделированию эволюционных процессов в материалах с внутренней микроструктурой

В.В. Лепов, В.С. Ачикасова, А.А. Иванова, К.Я. Лепова

Институт физико-технических проблем Севера СО РАН, г. Якутск

*Приведены основные положения и приложение структурного подхода к построению многоуровневых моделей накопления повреждений и разрушения материалов различной природы с иерархической структурой дефектности. Авторы, приняв в качестве основы подход микро- и макроскопического физического моделирования, расширяют его на сложные многоуровневые (многомасштабные) системы с внутренней микроструктурой, имеющей, как правило, иерархическую организацию и эволюционирующей под действием внешних факторов. Со временем это приводит к процессу накопления в материале повреждений и последующему разрушению. Дан анализ имеющихся многоуровневых подходов и показана возможность создания полномасштабных моделей на основе теоретического анализа и данных эксперимента. Авторы на основе работ отечественных и зарубежных авторов приходят к необходимости постановки эксперимента на субмикроскопическом уровне, позволяющего количественно оценить процесс накопления повреждений и выявить закономерности разрушения материалов. Новизной подхода является применение структурных моделей и логистической функции для оценки эволюции поврежденности на нескольких структурных уровнях, а также прямые экспериментальные наблюдения *in situ* процессов повреждения на наноуровне. В исследовании также даны перспективы применения немарковского подхода и байесовской интерпретации вероятности для оценки безопасности и прогнозирования ресурса техники, эксплуатируемой в условиях Севера.*

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, накопление повреждений, вязкохрупкий переход, ударная вязкость, локомотивное колесо, безопасность, прогноз ресурса.

A Structural Multiscale Approach to the Modeling of Evolutionary Processes in Materials with Internal Microstructure

V.V. Lepov, V.S. Achikasova, A.A. Ivanova, K.Ya. Lepova

Institute of Physical and Technical Problems of the North SB RAS, Yakutsk

*The article describes the main provisions and the application of a structured approach to building a multi-level model of damage accumulation and fracture of materials of different nature with the structure of defects at different scales. As the basis of the study an approach of micro-macroscopic physical modeling was adopted, which has been developed for complex multilevel (multiscale) systems with internal microstructure and evolving under the action of external factors. As a rule, this leads to the process of damage accumulation in the material, and subsequent fracture. The analysis of existing multi-level approaches has been done, and the possibility of creating full-scale models on the basis of theoretical analysis and experimental data has been discussed. The authors on the basis of works of domestic and foreign authors come to conclusion about the necessity of the experiment at submicroscopic level, allowing to quantify the process of damage accumulation and to identify the patterns of fracture. The novelty of the approach is the use of structural models and Verhulst logistic function to assess the evolution of damage at several structural levels, as well as direct experimental *in situ* observation of damage processes at the nanolevel. The study also describes the prospects of non-Markovian approach and Bayesian probability interpretation for safety evaluation and lifetime prediction of equipment operated in the North conditions.*

Key words: multiscale modeling, damage accumulation, tough-brittle transition, impact toughness, locomotive tire, safety, lifetime prediction.

ЛЕПОВ Валерий Валерьевич – д.т.н., зам. директора, lepov@iptpn.ysn.ru, wisecold@mail.ru; АЧИКАСОВА Валентина Семеновна – инженер, achikasova@iptpn.ysn.ru; ИВАНОВА Анастасия Анатольевна – м.н.с., anastiv@mail.ru; ЛЕПОВА Кюнна Яковлевна – н.с., lep_kya@mail.ru.

Введение

Важность учета внутренней неоднородности, структуры материала обусловила разработку и широкое применение так называемых структурных моделей накопления повреждений и разрушения. Основное преимущество использования структурного подхода, в том числе при оценке технического состояния и ресурса сложных технических систем – преодоление известных ограничений полумпирических моделей, не включающих в себя явного описания физических явлений, происходящих в материале [1].

Другим важным аспектом при моделировании процессов накопления повреждений и разрушения в реальных материалах является учет иерархичности структурных повреждений и неоднородности свойств материала на различных уровнях [2,3]. В большинстве случаев это позволяет учитывать статистические модели. При этом формулировка моделей на основе статистических гипотез, учитывающих вероятностный характер свойств материалов на микро- и макроскопических уровнях, является физически обоснованной и предоставляет больше возможностей для прогнозирования влияния неоднородности свойств на закономерности деформирования и разрушения реальных конструкций [4–6].

Статистические теории прочности являются практически единственной основой для расчетного определения предельного состояния реальных материалов и конструкций, расчетные характеристики которых должны задаваться средней величиной и дисперсией, или законом распределения, а не диапазоном. Это позволяет предсказывать механические свойства материала, уровень его поврежденности в неоднородном поле напряжений и определить критерии достижения макроскопического предельного состояния материалов в различных условиях на основе представлений о поврежденности структуры материала и статистической изменчивости его локальных свойств [4,7].

Еще одно важное преимущество объединенных структурных моделей – возможность переноса экспериментальных данных, полученных для одного из видов нагружения и поведения материала, на другие и объединения экспериментальных данных, относящихся к различным видам напряженного состояния и внешнего воздействия. С этой точки зрения модели и часть результатов, полученных для механических систем, может быть перенесена на другие, такие как энергетические комплексы, социальные, экономические и живые системы. В них, наряду с присутствием изменяющейся со временем внутренней структуры, существенными становятся процессы с памятью, или так называемые немарковские процессы [8].

Описание подхода

На рис. 1 показана схема комплексной оценки предельного состояния и прогнозирования ресурса сложных систем на основе подхода структурного моделирования [5]. Схема апробирована на технических системах и в настоящее время включает в себя элементы исследований энергетических комплексов и живых систем, подразумевая исследования накопления повреждений на различных масштабах, в том числе выявление механизмов и количественных закономерностей при воздействии экстремальных условий *in situ* и *in vitro* на нано- и микроуровне, а также дальнейшее стохастическое моделирование и прогноз ресурса (жизненного цикла).

При этом исходными данными для моделей являются полученные на основе зондовой и оптической микроскопии и фрактографии размеры и количественные параметры распределения дефектов на различных структурных уровнях, характеризующие соответствующими фрактальными размерностями и их изменениями в процессе накопления поврежденности. Под структурным уровнем в данном случае подразумевается область масштабов, в которой преобладающим является определенный дефект структуры (например, вакансия, дислокация, скопление дислокаций, микротрещина, микропора, полоса сдвига, неметаллическое включение).



Рис. 1. Схема оценки ресурса сложных систем на основе подхода многоуровневого структурного моделирования

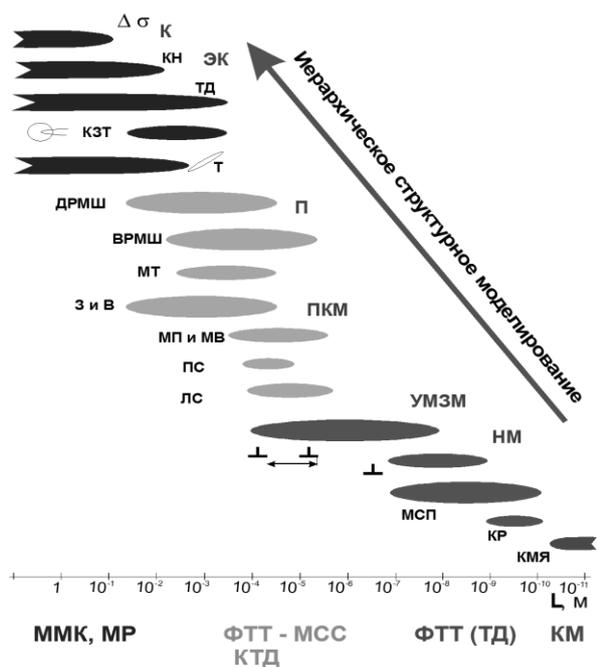


Рис. 2. Иерархия структурных элементов в конструкционных материалах, используемая для моделирования накопления поврежденности и разрушения

На основе обобщения трудов ряда отечественных и зарубежных исследователей предложена схема иерархии структурных элементов в конструкционных материалах, которая может быть использована для структурного моделирования накопления повреждений и разрушения (рис.2).

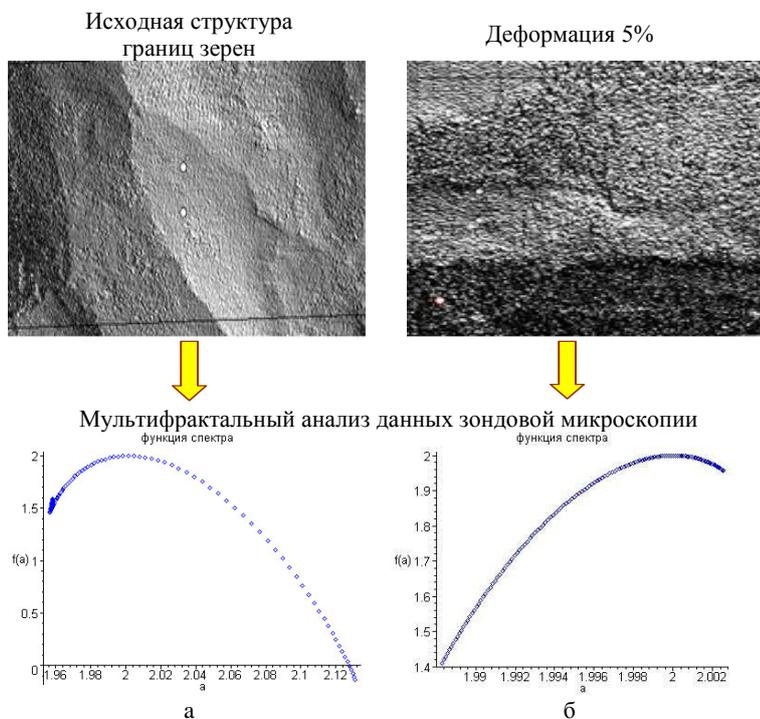


Рис. 3. Исследования эволюции параметров скейлинга и поврежденности на наноструктурном уровне (увеличение $\times 64\ 000$) хладостойкой стали: а – исходная структура; б – деформированная на 5%

Из ученых, внесших существенный вклад в понимание происходящих на различных структурных уровнях процессов и важность учета их взаимосвязанности для оценки прочности и ресурса материалов и конструкций, можно отметить В.Т. Троценко, С.Н. Журкова, Т. Yokobori, В.С. Иванову, В.В. Болотина, Л.Р. Ботвину, В.Е. Панина. Начиная от градиентов напряжений ($\Delta\sigma$) в конструкциях (К) и элементах конструкций (ЭК), вызываемых концентраторами напряжений (КН), технологическими дефектами (ТД), концевыми зонами (КЗТ) трещин (Т), воздействием различных внешних факторов, включая температурные, силовые, коррозионные и др. Также существенное влияние на прочность материала оказывает геометрия поверхности (П), выражаемая длиной и высотой рельефа микрошероховатости (ДРМШ и ВРМШ) и фрактальными размерностями. Внутреннее строение поликристаллических и композиционных материалов (ПКМ) представлено зернами и волокнами (З и В), молекулярной структурой полимеров (МСП), микропорами и микровключениями (МП и МВ), полосами и линиями скольжения (ПС и ЛС).

Отдельно можно выделить ультрамелкозернистые или субмикроструктурные материалы (УМЗМ) и наноматериалы (НМ), в которых особую роль приобретает учет таких элементов структуры, как дислокации и средние расстояния между ними ($\perp - \perp$), дефекты кристаллической решетки (КР), квантовый масштаб ядра (КМЯ).

Из других обозначений на рис.2 можно отметить размер структурного элемента L и области науки, занимающиеся разработкой соответствующих моделей: ММК и МР – механика материалов и конструкций и механика разрушения, ФТТ – физика твердого тела, КТД – континуальная теория дислокаций, МСС – механика сплошных сред и КМ – квантовая механика.

Характеристики скейлинга (структурного подобия на различных уровнях дефектности) и поврежденности поверхности, а также их эволюцию в ходе деформирования позволяет количественно оценить разработанная методика мультифрактального анализа изображений, полученных электронной атомно-силовой и туннельной микроскопией поверхности деформации и нагружаемых *in situ* образцов (рис.3) [9, 10].

Природа такого специфического явления, как вязкохрупкий переход, до конца еще не установлена, однако ряд проведенных исследований показал, что механизм его связан с затруднением дис-

локационного скольжения и ускоренным накоплением дефектности у границ зерен и вблизи структурных несовершенств [11]. Таким образом происходит охрупчивание материала и образование микротрещин, провоцирующих хрупкое разрушение при низких температурах. Совокупность факторов физико-химического состава, дислокационного скольжения, диффузионного переноса дефектов и отклика структурного строения материала при его деформировании и контролирует явление вязкохрупкого перехода. При этом особую важность приобретают исследования на наноструктурном уровне.

Данные и зависимости, полученные для эволюции дефектных структур на различных структурных уровнях, в дальнейшем используются для построения соответствующих моделей. К сожалению, в подавляющем большинстве современных моделей поведение систем определяется их текущим состоянием и никак не зависит от истории нагружения. Но если рассматривать жизненный цикл материала или конструкции, то разрушение представляет собой лишь конечную стадию последовательных процессов деформирования и деградации материала и определяется историей силовых, коррозионных, радиационных, температурных и других воздействий на него, а также изменениями структуры и физико-механических характеристик.

Немарковский подход и оценка риска

Стохастическая модель распространения трещины в многофазном, гетерогенном материале основана на механизме инициированного напряжения открытия микротрещин или микропор (в дальнейшем – микродефектов) на несплошностях или инородных включениях материала, их вязкопластическом росте и дальнейшей коалесценции с основной трещиной или близлежащими микродефектами [3,5,6].

Дальнейшая модификация модели производилась как в направлении – изменения вычислительных алгоритмов (в частности, применимых для динамического разрушения), так и в новых возможностях визуализации, представляемых развитием Web-ориентированного программирования, в частности, на языке Jade шаблонов нового поколения для Java script (рис.4). Модель представлена в виде Web-интерфейса по адресу <http://iptpn.ysn.ru/hdr/>. По просьбам иностранных коллег интерфейс переведен на английский язык.

Сложностью описания немарковских процессов является нелокальность их во времени, математически выражаемая в виде интегродифференциальных уравнений, которые и определяют эволюцию системы. Одним из следствий учета истории происходящих событий является изме-

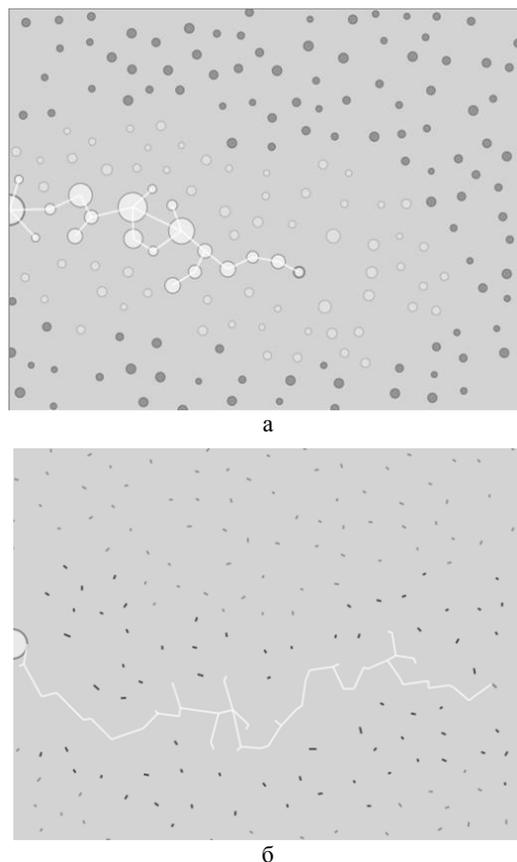


Рис. 4. Примеры визуализации роста трещин с различной конфигурацией начальных дефектов, реализованные на Java script: а – пластичный материал, вязкий рост пор; б – хрупкий материал, рост трещин

нение вероятностной картины. От классической частотной переходят к байесовской интерпретации вероятности, когда ее можно определить не как объективную случайность, а как меру незнания, которая уменьшается с получением дополнительных сведений о событии. С этой точки зрения байесовский подход является обобщением булевой логики, более обоснован и математически корректен.

Рассмотрен простейший случай немарковского процесса – накопление повреждений в ободе железнодорожного колеса. Интегральный эффект от множества различных дефектов, растущих и размножающихся на нескольких структурных уровнях (масштабах) в пределах локальной области, учтен зависимостью, выведенной ранее на основе логистического уравнения или уравнения Ферхюльста, для динамики дефектов дислокационного и недислокационного происхождения [12]:

$$\frac{d\psi}{dt} = f(T, \sigma) \cdot \psi \cdot (1 - \psi), \quad (1)$$

где ψ – поврежденность, T – температура, σ – напряжение.

С учетом приближенного решения этого уравнения и оценки вязкохрупкого перехода в стали испытаниями на ударную вязкость величина ударно-контактной поврежденности может быть записана в виде [13]:

$$\psi = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \int_{T_0}^{T_{y_j}} \left(1 - \frac{KCV_j(T)}{KCV_0} \right)^m, \quad (2)$$

где KCV_0 и KCV_j – ударная вязкость стали при комнатной температуре, соответствующая моменту j -го повреждения, $m \sim 0,25-0,3$ – эмпирический коэффициент, зависящий от материала и вида НДС, K – общее число стыков рельс на эксплуатируемом участке железной дороги. Выражение (2) служит оценкой накопления поврежденности в материале бандажа локомотивных колес в условиях быстрого разрушения отколом при низких климатических температурах эксплуатации.

С учетом байесовского подхода к оценке вероятности и выражения для поврежденности (2) условие разрушения колеса при эксплуатации в зимнее время будет выглядеть следующим образом:

$$\psi = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \left[\left(1 - \frac{KCV_j}{KCV_0} \frac{p(T|\theta)p(\theta)}{\int_{\theta_0}^{\theta_j} p(T|\theta)p(\theta)d\theta} \right)^m \right] = 1, \quad (3)$$

где $p(\theta)$ – априорные знания о величине θ , а вероятность наблюдения выборки температуры колеса $T=(T_1, \dots, T_n)$ определяется значением $p(T|\theta)$. Априорные знания о температуре на участке эксплуатации колеса могут быть получены на основе метеорологических данных и в дальнейшем уточнены решением теплофизической задачи и результатами соответствующего эксперимента.

До сих пор в современных нормативных документах вероятность аварии или выхода техники из строя выражается как классическая вероятностная величина, оцениваемая приемлемым, или допустимым, статистическим риском. Расчет вероятности ведется без учета априорных знаний, уточнения значений в результате истории наблюдений и моделирования. С точки зрения безопасности задание величины приемлемого риска позволяет уйти от общей проблемы защиты от аварий и катастроф и свести ее к экономической задаче [14]. Ряд ключевых вероятностных факторов, влияющих на безопасность и их взаимодействие, не учитывается в должной мере, например, разброс свойств и накопление повреждений в материале, дефектность сварных швов, внешние воздействия, а также неквалифицированные действия персонала, что приводит к

неизбежности отказов и катастроф, а не к их предотвращению. Применение к оценке безопасности и ресурса техники подходов, основанных на немарковской парадигме, в частности, на байесовской интерпретации вероятности, позволит давать более четкие прогнозы и предотвращать жертвы, обусловленные техногенными факторами.

Заключение

Таким образом, в статье представлен структурный подход к многомасштабному моделированию накопления повреждений в гетерогенных материалах с микроструктурой по установленному механизму роста трещины в массиве взаимодействующих дефектов. Разработана расчетная модель накопления ударно-контактных повреждений в материале обода железнодорожного колеса при низких температурах, когда ударная вязкость конструкционной стали существенно падает в результате вязкохрупкого перехода. Предложено учитывать внутреннюю структуру материала и сложное напряженно-деформированное состояние в технических системах, эксплуатирующихся при низких климатических температурах, путём использования немарковского подхода в моделировании и байесовской интерпретации вероятности при оценке безопасности и риска.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант №15-41-0501015) и в рамках научного проекта III.28.1.1 программы СО РАН.

Литература

1. Болотин В.В. Ресурс машин и конструкций. – М.: Машиностроение, 1990. – 448 с.
2. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения твердых тел. – Новосибирск: Наука, 1990. – 255 с.
3. Лепов В.В., Лепова К.Я., Алымов В.Т., Ларионов В.П. Стохастическое моделирование разрушения гетерогенной повреждаемой среды // Физическая мезомеханика. – 2002. – Т.5, № 2. – С. 23–41.
4. Доронин С.В., Лепихин А.М., Москвичев В.В., Шокин Ю.И. Моделирование прочности и разрушения несущих конструкций технических систем. — Новосибирск: Наука, 2005. — 250 с.
5. Valeriy Lepov. Structural evolution model of damage accumulation processes in modern metallic and polymer nanomaterials // World Journal of Engineering. – 2013. – Vol. 10(3). – P. 205–212.
6. Куксенко В.С. Диагностика и прогнозирование разрушения крупномасштабных объектов // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47, № 5. – С. 788–792.
7. Lepov V.V. et al. Modeling of the Damage Accumulation and Fracture: Structural-statistical Aspects // Key

Engineering Materials. – 2007. – Vol. 345–346. – P. 809–812.

8. Lepov V.V., Loginov A.B. Non-Markovian evolution approach to structural modeling of material fracture // World Journal of Engineering. – 2012. – Vol. 9(3). – P. 207–212.

9. Лепов В.В., Ларионов В.П., Алымов В.Т. Новые подходы к оценке предельного состояния конструкций // Наука и образование. – 2001. – №3. – С. 36–42.

10. Лепов В.В., Иванова А.А., Ачикасова В.С., Лепова К.Я. Структурно-статистический подход к иерархическому моделированию эволюции поврежденности // Международная конференция «Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании»: тезисы докладов. – Павлодар, Казахстан, 20–22 сентября 2006 г. Электронный ресурс http://www.sbras.ru/ws/show_abstract.dhtml?ru+148+10056.

11. Ачикасова В.С., Лепов В.В. Низкотемпературный вязкохрупкий переход и внутреннее трение // Наука и образование. – 2015. – № 1. – С. 75–77.

12. Григорьев А.В., Лепов В.В., Тагров В.Н. Оценка ресурса элементов железнодорожной техники, эксплуатирующейся в условиях низких климатических температур // Наука и образование. – 2014. – № 1. – С. 35–39.

13. Архангельская Е.А., Лепов В.В., Ларионов В.П. Связная модель замедленного разрушения повреждаемой среды // Физическая мезомеханика. – 2001. – Т. 4, № 4. – С. 81–87.

14. Лепов В.В. Искусство принятия решений: краткая история и современное состояние // Наука и образование. – 1996. – № 2. – С. 93–97.

Поступила в редакцию 01.10.2015

УДК 620.172.224.2

Влияние экструзии и винтового прессования на структуру и механические свойства низколегированной стали

А.М. Иванов, Н.Д. Петрова, В.В. Лепов

Институт физико-технических проблем Севера СО РАН, г. Якутск

Представлен комбинированный метод интенсивной пластической деформации, сочетающий экструзию и винтовое прессование. Метод реализован в разработанном устройстве и позволяет получить металлический винтовой профиль из упрочненного ультрамелкозернистого материала. Описываются технологическая оснастка и параметры испытаний, приведены данные о структуре материала, механических свойствах низколегированной стали, подвергнутой комбинированному воздействию экструзией и винтовым прессованием. Измельчение структуры позволило повысить прочность стали в 1,4 раза со снижением пластичности на 38 %. Анализ структуры позволил предположить, что упрочнение материала произошло за счет дисперсионного упрочнения и повышения плотности дислокаций, в отличие от дробления и размытия зерен феррита в случае сильных степеней деформации, а также фрагментации субзеренных блоков при реализации схемы прессования с гидростатическим давлением.

Ключевые слова: экструзия, винтовое прессование, сталь, структура, механические свойства.

Influence of Extrusion and Helical Pressing on Structure and Mechanical Properties of Low-Alloy Steel

A.M. Ivanov, N.D. Petrova, V.V. Lepov

Institute of Physical and Technical Problems of the North SB RAS, Yakutsk

A combined method of intensive plastic deformation combining extrusion and screw pressing is presented. The method has been realized in the developed device and allows to produce a metal screw profile from a

ИВАНОВ Афанасий Михайлович – к.т.н., в.н.с., a.m.ivanov@iptpn.ysn.ru; ПЕТРОВА Нюргюяна Дмитриевна – м.н.с., nakalykay@mail.ru; ЛЕПОВ Валерий Валерьевич – д.т.н., проф., зам. директора, lepov@iptpn.ysn.ru.