

УДК 620.193

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КИНЕТИКИ РАЗРУШЕНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

© 2011 С.Б. Коньгин

Самарский государственный технический университет

Поступила в редакцию 21.03.2011

Показаны возможности использования метода вероятностного клеточного автомата для оценки кинетических характеристик процесса разрушения материала под действием механических напряжений. Кратко рассмотрены основные принципы построения модели. Представлено сравнение результатов моделирования с кинетической теорией прочности твердых тел.

Ключевые слова: *кинетическая теория прочности, моделирование, вероятностный клеточный автомат*

В опубликованных ранее работах [1, 2] были продемонстрированы возможности использования метода вероятностного клеточного автомата (ВКА) [3] для моделирования различных физико-химических процессов. В рамках настоящей работы остановимся на демонстрации возможности использования метода ВКА для моделирования кинетики простейших процессов разрушения твердых тел, находящихся под действием механических нагрузок [4]. Как известно, процессы усталостного разрушения конструкционных материалов под действием длительных механических нагрузок играют очень важную роль в машиностроении. Данные явления весьма сложны и разнообразны, поэтому их исследованию посвящено множество работ [4, 5]. Одним из подходов к описанию временного разрушения твердых тел является кинетическая теория прочности [4]. Согласно данной теории разрушение твердого тела под действием нагрузки происходит за счет последовательного разрыва межатомных связей в материале, обусловленного тепловыми флуктуациями энергии частиц. Внешнее растягивающее механическое напряжение снижает энергию активации данных процессов и, соответственно, ускоряет процесс разрушения.

Как известно из кинетической теории прочности твердых тел, среднее время τ , за которое произойдет разрушение материала, определяется выражением [4]

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{W_a - \gamma\sigma}{kT}\right), \quad (1)$$

где τ_0 – период колебаний атомов; W_a – энергия активации разрыва связи; γ – коэффициент кинетической прочности; σ – механическое напряжение; k – постоянная Больцмана; T – температура в системе.

Данная теория получила широкое экспериментальное подтверждение и достаточно часто используется на практике. При создании стохастической модели разрушения с помощью метода ВКА будем проводить прямое имитационное моделирование элементарных процессов разрыва связей между атомами твердого тела. Основным объектом рассмотрения при этом является микроскопический объем материала, содержащий определенное количество межатомных связей. Как и в предыдущих работах [1, 2] будем считать, что сетка ячеек ВКА c_i соответствует атомной структуре материала, а состояния ячеек определяются типом находящихся в них атомов. При построении математической модели будем считать, что в системе присутствует только один химический компонент (атомы материала) и может реализоваться единственный элементарный физико-химический процесс: термофлуктуационный разрыв межатомной связи, ослабленной приложенными механическими напряжениями. Также считается, что обратный процесс самопроизвольного образования разорванной межатомной связи невозможен. В этом случае возможные состояния ячеек ВКА S будут следующими: \hat{A} – в данной ячейке межатомная связь не разорвана; \hat{Z} – в данной ячейке межатомная связь разорвана. В начальный момент времени (состояние ячеек ВКА s_0) все связи считаются неразорванными.

Коньгин Сергей Борисович, кандидат технических наук, заведующий кафедрой "Машины и аппараты химических производств". E-mail: mahp@inbox.ru

Элементарному процессу разрыва связи соответствует переход $\hat{A} \rightarrow \hat{Z}$. Кроме того, в множество возможных переходов между состояниями ячеек ВКА J входят "нулевые" процессы $\hat{A} \rightarrow \hat{A}$ и $\hat{Z} \rightarrow \hat{Z}$.

Выбор реализующихся процессов на каждом шаге моделирования производится с помощью равномерно распределенного генератора случайных чисел θ в соответствии с вероятностями переходов w_{ij} . Тогда математическая модель процесса будет иметь вид, представленный в формулах (2) – (10). Соответствующая диаграмма состояний представлена на рис. 1.

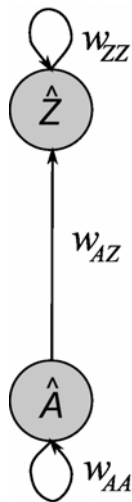


Рис. 1. Диаграмма состояний ячеек ВКА при моделировании кинетических разрушений тел при механических нагрузках

$$c_i = \{S, s_0, \theta, J, W\}, \quad (2)$$

$$S = \{\hat{Z}, \hat{A}\}, \quad (3)$$

$$s_0 = \hat{A}, \quad (4)$$

$$\theta \in [0;1], \quad (5)$$

$$J = \{(\hat{Z}, \hat{Z}), (\hat{A}, \hat{Z}), (\hat{A}, \hat{A})\}, \quad (6)$$

$$W = \{w_{ZZ}, w_{AZ}, w_{AA}\}, \quad (7)$$

$$w_{ZZ} = 1, \quad (8)$$

$$w_{AA} = 1 - w_{AZ} \quad (9)$$

$$w_{AZ} = \exp\left(-\frac{W_a - \gamma\sigma}{kT}\right) \quad (10)$$

Для реализации представленной модели был разработан программный продукт, с по-

мощью которого проводилось прямое имитационное моделирование процессов разрушения. Для анализа адекватности результатов моделирования методом ВКА были использованы исходные данные и экспериментальные результаты, представленные для чистых металлов в работе [4]. При моделировании методом ВКА условно считалось, что полное разрушение материала происходит при разрыве последней межатомной связи. На рис. 2 представлено сравнение результатов моделирования процесса разрушения методом ВКА с аналитической зависимостью (1) для алюминия (отжиг при температуре 550°C; $W_a = 2,3$ эВ; $\gamma = 0,418 \cdot 10^{-2}$ эВ·см²/кгс, $\tau_0 = 10^{-13}$ с) [4].

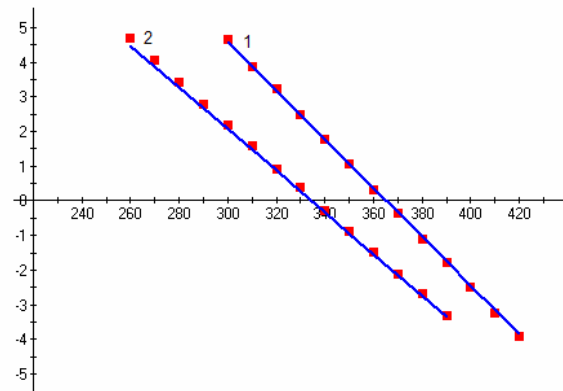


Рис. 2. Зависимость долговечности $\lg \tau$, с, от механического напряжения σ , МПа, для алюминия при различных температурах: 1 – 300 К, 2 – 350 К (сплошные линии – уравнение (1), точки – метод ВКА)

Микроскопические исходные данные, использованные в методе ВКА, достаточно хорошо согласуются со значениями макроскопических параметров, представленных выше. Исключение составляет период тепловых колебаний атомов τ_0 , который в методе ВКА должен быть несколько больше, чем в выражении (1). Из рассмотрения данных, приведенных на рис. 2, видно, что результаты, полученные с помощью метода ВКА, хорошо согласуются с зависимостью (1). В логарифмическом масштабе ($\lg \tau$) расхождение между ними составляет порядка 2-5%, а в линейном масштабе существенно выше и может достигать величины порядка 15-20% (вследствие экспоненциальной зависимости). Сравнение непосредственно с экспериментальными данными по длительной прочности не проводилось по причине отсутствия данных о погрешности измерений.

На рис. 3 представлена кинетика разрушения связей с течением времени, полученная в результате моделирования методом ВКА. На данной зависимости относительный размер возникающих микротрещин определялся по формуле

$$\varepsilon = \frac{l}{l_0}, \quad (11)$$

где l_0 – исходный размер образца; l – размер образующихся трещин.

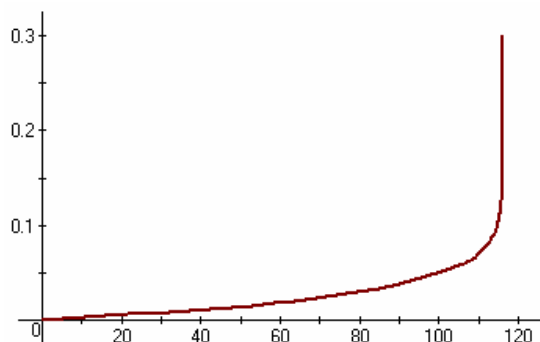


Рис. 3. Зависимость относительных размеров трещин ε , возникающих в металле, от времени t , полученная с помощью метода ВКА

Точное сравнение с экспериментальными данными здесь также не проводилось, но характер полученной зависимости в целом соответствует данным, представленным в работах по кинетической теории прочности твердых тел [4]. На начальном этапе нагружения внешняя нагрузка распределена по всему сечению материала, и значения локальных механических напряжений, приходящихся на одну межатомную связь, здесь относительно низкие. Поэтому скорость накопления разрушений в данном случае невелика. По мере разрыва межатомных связей внешняя нагрузка распределяется по все меньшему количеству связей, локальные механические напряжения возрастают, и резко увеличивается скорость образования трещин. Представленные в данном пункте ре-

зультаты свидетельствуют о принципиальной возможности использования данного варианта метода ВКА для моделирования процессов разрушения материалов под действием механических нагрузок. Следует отметить, что схожие работы ведутся с использованием других вариантов метода, например, метода подвижных клеточных автоматов.

Выводы: в перспективе на базе использования предлагаемого варианта метода ВКА могут быть созданы комплексные модели процессов разрушения, учитывающие более широкий круг элементарных физико-химических составляющих и компонентов, которые позволят повысить точность прогнозирования срока службы в случаях нагружения, осложненных сопутствующими процессами (например, коррозии и т.п.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. *Коньгин, С.Б.* Моделирование процессов адсорбции методом вероятностного клеточного автомата // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета имени академика С.П. Королева. Серия: Актуальные проблемы радиоэлектроники. 2002. Вып. 7. С. 58-64.
2. *Коньгин, С.Б.* Стохастическая модель окисления металлов в газовой среде / *С.Б. Коньгин, С.П. Лесухин.* // Известия Самарского научного центра РАН. Т.12. 2010. №1(2). С. 377-380.
3. *Ванаг, В.К.* Исследование пространственно распределенных динамических систем методами вероятностного клеточного автомата // Успехи физических наук. 1999. Т. 169, №5. С. 481-505.
4. *Регель, В.Р.* Кинетическая природа прочности твердых тел / *В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.И. Томашевский* // Успехи физических наук, 1972. Т. 106. Вып. 2. С. 193-228.
5. *Богдановф, Дж.* Вероятностные модели накопления повреждений / *Дж. Богдановф, Ф.Козин.* – М.: Мир, 1989. 344 с.

USE OF THE PROBABILITY CELLULAR AUTOMATIC MACHINE METHOD FOR MODELING THE KINETIC OF SOLID MATERIALS DESTRUCTION

© 2011 S.B. Konygin
Samara State Technical University

Possibilities of use the method of probability cellular automatic machine for estimation the kinetic characteristics of destruction process of material under the influence of mechanical pressure are shown. Main principles of model construction are shortly considered. Comparison of modeling results with the kinetic theory of solid materials durability is presented.

Key words: *kinetic theory of durability, modeling, probability cellular automatic machine*

Sergey Konygin, Candidate of Technical Sciences, Head of the Machines and Apparatuses of Chemical Manufactures Department. E-mail: mahp@inbox.ru