

ИССЛЕДОВАНИЕ И РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ПО УСЛОВИЯМ НАДЕЖНОСТИ КОНСТРУКЦИИ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ И ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

© 2018 А.Н. Коптев, С.Ф. Глустенко

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва

Статья поступила в редакцию 01.02.2018

Проведены комплексные эксперименты по установлению зависимости характера формирующейся дислокационной структуры, плотности распределения микропор и микротрещин, микродефектов внутренней структуры в зависимости от условий кристаллизации расплава. Исследованы характеристики получаемых микроструктур конструкционных сталей по заданным условиям эксплуатации. В этих целях с помощью соответствующих технических устройств создавалось внешнее механическое, акустическое, магнитное воздействие на расплав металла при его выдержке и кристаллизации. Установлено, что скаляр вектора приращений параметров кристаллизующихся микроструктур относительно базовой точки M_0 в этом случае может быть представлен тензорами второго ранга: приращений линейных и угловых деформаций. Исследована кинетика роста кристаллов формирующейся структуры в жидком расплаве металла в момент соприкосновения отдельных кристаллизовавшихся микрочастиц по их границам с образованием кристаллитов с параметрами, зависящими от условий кристаллизации, что обеспечивает математическое моделирование процессов кристаллизации и позволяет прогнозировать возможности получения гарантированных свойств структуры сплава в зависимости от условий процессов плавки и кристаллизации расплава. *Ключевые слова:* микроструктура конструкционных материалов, структурная неоднородность, корреляция между параметрами собственной и управляемой анизотропии, кинетика формирования микроструктуры, кристаллизация, фазовый состав, прочность, пластичность, температурный режим.

Развитие научных основ процессов исследования возможностей управления формируемой в процессах кристаллизации расплава структурой с целью получения обладающей более высокими эксплуатационными свойствами микроструктуры (наноструктуры) материалов для изделий авиационной и космической техники позволяет расширить возможности технологических процессов при получении ответственных деталей с заданными свойствами по характеристикам надежности, динамики, виброакустики. Предметом исследований являются условия формирования микроструктуры конструкционных материалов, обеспечивающие однородность строения и заданное значение коэффициента структурной анизотропии характерных фаз. В работе коэффициент структурной анизотропии определяется как отношение характерных размеров фазовых включений по выделяемым величинам их длины и ширины: $b = d_{cp}/l_{cp}$, где l_{cp} – продольный средний размер; d_{cp} – поперечный средний размер составной фазы. При генерации источником акустических импульсных сдвиговых волн применительно к исследуемому материалу од-

ной из определяющих характеристик является относительная разница скоростей сдвиговых волн, ортогонально поляризованных относительно исследуемого направления.

Целью исследований является создание методики построения управляемых технологических процессов получения конструкционных материалов, у которых могут быть некоторым образом определяемые соотношения между возникающими в определённых направлениях напряжениями или деформациями при эксплуатационных нагрузках и соотношением различных величин скоростей сдвиговых волн, поляризованных по различным схемам относительно заданного направления. Заданный безразмерный параметр в виде величины акустической анизотропии материала может считаться количественной характеристикой состояния и структурных изменений в материале конструкции.

Задачами исследований являются способы и методы установления, какой из технологических факторов оказывает косвенное или доминирующее влияние на внутренние процессы фазовых превращений, характер кристаллизации и рекристаллизации, диффузионные процессы, характер формирования ликваций, которые определяются и сопровождаются геометрическим изменением окрестности исследуемых элементов микроструктуры и наноструктуры. В

Коптев Анатолий Никитович, доктор технических наук, профессор института авиационной техники.

Глустенко Станислав Федотович, кандидат технических наук, доцент института ракетно-космической техники. E-mail: titan250@mail.ru

известных работах указанные задачи решались на уровне отдельных видов фаз, при ограниченных условиях виброакустического воздействия на получаемые образцы материалов, а также изделий из них. Предлагаемые пути решения задач формирования структуры материалов с заданными свойствами заключаются в способах воздействия на расплав в процессе его кристаллизации на основе математического моделирования процессов, развития методов исследования динамики изменения формируемой структуры в процессах получения материалов. Например, относится установление условий формирования, динамики и характера приращений таких перемещений du_i которые обеспечивают формирование прогнозируемой микро – наноструктуры материала конструкций. Определено, что в управляемых заданным образом процессах кристаллизации и рекристаллизации можно в векторном пространстве изменять размеры микрочастиц – величины d_{cp} , l_{cp} . Анализ процессов показал, что наблюдаемое формоизменение некоторой кристаллизующей и структурируемой частицы с началом вектора параметров в точке $M_0(x_i)$ локальной системы координат за дискретный отрезок времени Δt_i течения процесса можно представить в виде разложения в математически определяемый ряд величины его приращения в виде непрерывной функции по каждому исследуемому признаку процесса. Например, исследование процессов приращения частицы в виде перемещений du_i формируемой микро, - наноструктуры показало, что за время Δt_i вектор $\overline{M_0M_i}$ в окрестности M_0 перемещается в положение $\overline{M_0M_j}$, а скаляр вектора приращений и текущий угол поворота относительно базовой точки M_0 в этом случае может быть представлен тензорами второго ранга: приращений деформаций с компонентами $dl_{ij} = \frac{1}{2}(du_{ij} + du_{ji})$ и

приращений углов поворота с компонентами $d\omega_{nm} = \frac{1}{2}(d\omega_{nm} - d\omega_{mn})$, что соответствует формированию более дисперсной микроструктуры сплава (рис. 1).

Рассмотрим методику изучения физической природы и построения математических моделей процессов кристаллизации расплава, которая позволяет также эффективно расширять существующие информационные базы для построения алгоритмов расчётов параметров условий формирования макро- и микроструктуры деталей из сталей в процессах литья по различным технологическим схемам, начиная с подготовки состава расплава и в зависимости от назначения получаемых изделий. Также ставится задача совершенствования адекватной базы математических моделей металлургических процессов, которые комплексно описывали бы взаимосвязь химического состава, способов литья, вариации параметров процессов, условий выбора оборудования и др. в динамике процессов кристаллизации расплава, а также учета и влияния носителей наследственной информации в формируемых структурах. При этом технологическое наследование свойств должно быть достаточно управляемым процессом, обеспечивающим однозначное формирование состава и структуры материала изделий в зависимости от условий процесса. Следовательно, для этого процессы плавки и кристаллизации расплава будем описывать не только физической моделью, но и вполне определенными аналитическими представлениями взаимосвязей параметров процессов. Это позволяет обеспечить возможность получения расчетным путем одного из главных параметров – спектра относительных значений интенсивности остаточных средних касательных напряжений $\tau^0 : \tau_s$, относительных значений интенсивности

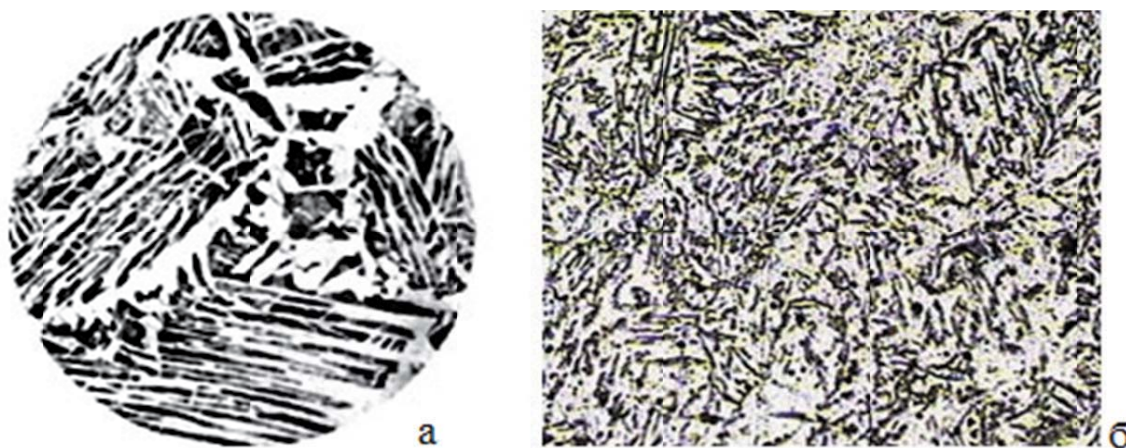


Рис. 1. Формирование структуры сплава по заданным условиям: а – без управляющих воздействий; б – ультразвуковая обработка с амплитудой напряжения 120 Мпа

остаточных средних нормальных напряжений $\sigma^0 : \sigma_s$ в динамике процессов кристаллизации, где σ^0, τ^0 - интенсивность нормальных и касательных остаточных напряжений, σ_s, τ_s - среднее нормальное и касательное напряжение при чистом растяжении – сжатии и сдвиге.

Были проведены комплексные эксперименты по установлению зависимости характера формирующейся дислокационной структуры, плотности распределения микропор и микротрещин, микродефектов внутренней структуры в зависимости от условий протекания техпроцессов литья. В этих целях помощью соответствующих технических устройств создавалось внешнее механическое, акустическое, магнитное воздействие на расплав металла при его выдержке и кристаллизации.

Важное значение для формирования структуры при кристаллизации имеет определение того, какой из факторов оказывает доминирующее влияние на внутренние процессы фазовых превращений, характер кристаллизации и рекристаллизации, диффузионные процессы и характер формирующихся ликваций, который определялся и сопровождался геометрическим изменением окрестности исследуемых элементов микроструктуры и наноструктуры. Особый характер имеет наблюдаемая при этом кинетика изменения роста кристаллов формирующейся структуры в жидком расплаве металла в момент соприкосновения отдельных кристаллизовавшихся микрочастиц по их граням. Например, при некоторых условиях изменяются и растут только свободные их грани, что приводит к нарушению правильной геометрической формы новообразований. В этом случае образуются кристаллиты (зерна) с размерами, зависящими от условий кристаллизации. При проведении экспериментов было установлено, что возможно регулирование процессов получения микро-, наноструктуры зерна при кристаллизации металла также за счёт комбинации указанных выше внешних воздействий на центры кристаллизации, что способствует получению достаточно мелкого зерна при воздействии механизмов регулирования процессов кристаллизации на условия образования кристаллов и в дальнейшем на качество сплавов.

Установлено, что формоизменение кристаллита в окрестности образовавшейся частицы M_0 связано с появлением внутренних напряжений и соответствующих деформаций образующихся структур. Для количественной оценки формирующейся структуры с упруговязкопластическими свойствами использовались инвариантные математические модели для оценки характеристик интенсивности сдвига w , степени деформации сдвига V , относительного изменения

объема ε , среднего нормального напряжения σ и интенсивности касательных напряжений τ . После окончания кристаллизации и дальнейшего снижения температуры сплава было установлено, что происходит неуправляемое остаточное формоизменение микро-, наноструктур в окрестности частицы M_0 и формируется соответствующее локальное множество доменов с доминирующим в локальной окрестности характерным напряженно-деформированным состоянием. Уровень остаточных напряжений при этом можно было охарактеризовать через величины относительных значений интенсивности касательных остаточных напряжений $\tau^0 : \tau_s$, относительных значений среднего нормального остаточного напряжения $\sigma^0 : \sigma_s$ и показателей Лодэ μ_s^0 .

Термодинамические параметры расплава как молекулярной системы в принципе определяются распределением Гиббса и статистической суммой при расчётах параметров кристаллов в гармоническом приближении. Однако исследование систем, в которых существенную роль играют корреляционные эффекты, сопряжено с техническими трудностями, принимающими подчас принципиальный характер.

Исследования показали, что характер окончательных механических и физических свойств сплава и его структура при заданных условиях кристаллизации определяются нестационарностью процесса кристаллизации, динамикой градиента температуры по объему расплава, кинетической энергией кристаллизующихся частиц и др., поэтому построение и решение дифференциальных уравнений равновесия конкретной структуры и состава при определенных или варьируемых начальных и граничных условиях должно учитывать все значимые параметры процесса и потенциалы компонент образований. Статистическая теория жидкости в основном ограничивается исследованием модели простых жидкостей методом приближенных интегральных уравнений неопределенной точности, решения которых по условиям термодинамики недостаточно согласованы, то есть вычисленные на их основе параметры прогнозируемой структуры в ряде случаев не соответствуют параметрам фактически полученной микроструктуры сплава, а поправки к этим уравнениям не решает указанную проблему.

Метод построения математических моделей процессов и уравнений, свободный от указанного недостатка, основан на том, что все потенциалы, включая термодинамический потенциал, удобно выражать в единицах $kT=1/\beta$, так что $\partial\varphi/\partial T = -\varphi/T$, а для классической системы распределение Гиббса можно определить производящий функционал Боголюбова $L(u)$ совокупности частичных функций распределения F_n

(частичных плотностей $p_n = p^n F_n$) и их корреляций [4].

Рассмотрим один из наиболее значимых факторов процессов кристаллизации - термодинамический потенциал ϕ . При текущей температуре T применительно к динамике кристаллизующегося расплава термодинамический потенциал ϕ имеет вид:

$$\partial\phi/\partial T = -\phi/T. \quad (1)$$

Соответственно, применима классическая система распределения Гиббса, которая определяет производящий функционал совокупности функций распределения частичных плотностей $p_n^0(\{n\})|_{u=0}$ структурных включений $p_n = p^n F_n$ и их корреляций для заданной совокупности частных функций распределения F_n решетки Z и потенциальной энергии взаимодействия N :

$$p_n^0(\{n\}) = \frac{\delta^n Q(u)}{\delta u(1)\dots\delta u(n)}|_{u=0}; \quad (2)$$

$$Q(u) = \int \exp(-U_N) \prod(1+u(i)) d\{N\} / Z_N = Z_N(u) / Z_N(0). \quad (3)$$

При выполнении условия $u(i) \neq 0$ представим частичные плотности p_s во внешнем поле некоторой природы $\phi(q)$ в виде:

$$p_s(\{s\}) = Z^1(u) \prod_s(1+u(i)) \delta^S Z(u) / \prod_s \delta u(i),$$

$$\text{где } 1+u(q) = \exp(-\phi(q)), \quad (4)$$

где F_n - совокупности частных функций распределения частичных плотностей $p_n = p^n F_n$.

Введем функционал

$$W(u) = h Q(u) = (F(0) - F(u)), \quad (5)$$

который в этом случае является производящим корреляционных функций вида

$$g_n(\{n\}) = \prod p(i) h_n(\{n\}) = \prod(1+u(i)) \delta^n W(u) / \prod \delta u(i),$$

позволяющих выполнить разложение Урсе-ла-Майера функций вида p_n и определяющих возможность и условия изменения в этом поле свободной энергии F , либо потенциала Ω при переходе к большому распределению Гиббса.

Следовательно, и частичные плотности и корреляции являются функциональными величинами, зависящими от потенциалов взаимодействия, в случае простых жидкостей - потенциала внешнего поля и парного потенциала $\phi(r)$. Функциональные разложения по функциям Майера $f(r) = \exp(-\phi(r)) - 1$ и модификация этих разложений - вириальные разложения и их частичное суммирование приводят к рядам ограниченной сходимости при вычислении

производящих функционалов в расчётах характеристик гиббсовских распределений значений параметров формируемой решеточной системы в процессе кристаллизации расплава при некоторых определенных внешних управляемых воздействиях.

Соответственно анализ полученных результатов показал, что условия получения структур на микроуровне (наноструктур) зависят от правильности выбора и построения математической модели технологических процессов получения структуры кристаллизации и задания определяющих соотношений факторов процесса. В частности, математическое моделирование процессов кристаллизации позволяет прогнозировать возможности получения гарантированных свойств структуры сплава в зависимости от условий процессов плавки и кристаллизации расплава, а также вида и мощности управляющих воздействий на расплав, то есть обеспечивать такое соотношение σ^0, τ^0 и μ_s^0 , при котором разрушение металла в процессах последующей эксплуатации не наступит при допустимых и прогнозируемых величинах его упругой и пластической деформации.

В расплаве термодинамические параметры могут быть представлены через потенциалы, в том числе и термодинамический потенциал, в соотношениях $kT = 1/\beta$, при этом $\frac{\partial\omega}{\partial T} = -\frac{\omega}{T}$.

В зависимости от типа и размера формируемой при кристаллизации микроструктуры, типа и размерности решетки, характера взаимодействия частиц можно создавать условия для получения регулярной кристаллической структуры с различной размерностью конфигурационного пространства.

Без нарушения общности подхода представим бесконечную систему с множеством частиц на одномерной решетке \bar{A} с бинарным взаимодействием с внешним полем некоторой физической природы. Потенциальную энергию взаимодействия конфигурации представим в виде:

$$U(N) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} n_i n_j Q_2(i-j) + \sum_{i \in Z} n_i Q_1(i), \quad (6)$$

где N - некоторая финитная функция, определенная на множестве Z и имеющая значения в интервале множества $\{0,1\}$,

n_i - значение функции N в точке $i \in Z$,

$Q_1(i)$ - потенциал внешнего поля со значениями на подмножествах $R \cup \{\infty\}$, удовлетворяющих предикату: $\forall \beta = (kT)^{-1} \geq 0$ при условии:

$$\exp\{-\beta Q_1(x)\} \equiv v \in L^\infty(Z). \quad (7)$$

Тогда бинарный потенциал взаимодействия молекул и частиц расплава будет иметь вид:

$$\begin{aligned} Q_2(i-j) &= \infty \text{ при } |i-j| = 0, \\ Q_2(i-j) &= \varepsilon \text{ при } |i-j| = 1, \\ Q_2(i-j) &= 0 \text{ при } |i-j| > 1 \end{aligned} \quad (8)$$

и должен удовлетворять следующему условию регулярности:

$$\begin{aligned} \in \forall \beta \geq 0, f_i &= \exp\{-\beta Q_2(i)\} - 1 \in L^1(Z); \\ f_i &= \exp\{-\beta Q_2(i)\} - 1 \in L^1(Z). \end{aligned} \quad (9)$$

Для изучения механизма образования кристаллической структуры при управляемом внешнем воздействии на расплав, а также межфазного взаимодействия формируемых структур, особенно при исследовании динамики многофазных структур, установления природы и механизмов взаимодействия доминирующих структур предположим, что производящие функционалы для характеристик гиббсовских распределений формируемой решеточной системы могут определяться в банаховом пространстве N_α , аналитически заданных на множестве $L^1(Z)$ функционалов вида:

$$A(t) = \sum_N a(N) \prod_{i \in Z} t_i^{n_i}. \quad (10)$$

И частичные плотности и корреляции являются функциональными, зависящими от потенциалов взаимодействия, в случае простых жидкостей – потенциала внешнего поля и парного потенциала $\varphi(r)$. Функциональные разложения по функциям Майера $f(r) = \exp(-\varphi(r)) - 1$ и модификация этих разложений – вириальные разложения и их частичное суммирование – приводят к рядам ограниченной сходимости.

Предлагается произвести замену переменных – в качестве независимых переменных выбрать не потенциалы, а частичные плотности или корреляции. Такая замена осуществляется функциональным преобразованием Лежандра

$$\Phi(x) \rightarrow \psi(y) = (xy) - \Phi(x),$$

замена аргумента x определяется условием $\partial \psi / \partial x = 0$, то есть $\psi(y)$ является экстремальным по x значением функции $\psi(x, y) = (xy) - \Phi(x)$, x является решением уравнения $y = \partial \Phi / \partial x$ и $d\psi = (x dy)$. При обратном преобразовании Лежандра $\psi(y) \rightarrow \Phi(x) = (xy) - \psi(y)$, $\partial \Phi / \partial y = 0$ функция $\Phi(x, y) = (xy) - \psi(y)$ экстремальна по y . Тогда $x = \partial \psi / \partial y$ и $d\Phi = (y dx)$.

(Альтернативное определение

$$\psi(y) = \Phi(x) - (xy)$$

отличается только знаком).

Аргументы x и y могут принадлежать любому пространству, быть действительным или

мнимым числом, многомерным вектором, функцией или функционалом, что соответствует реальному процессу управляемой кристаллизации.

Следовательно, термодинамический потенциал как функционал вариационной задачи расчёта параметров кристаллизации может иметь несколько минимумов. Глобальный минимум определяет стабильное состояние процесса. Другие минимумы определяют метастабильные состояния. Вариационный метод позволяет определить границы существования стабильного и метастабильных состояний. Критерий локальной устойчивости определяется свойствами корреляции, бинарной для фазового перехода первого рода, четвертого порядка для переходов второго рода.

Следует отметить, что вариационный метод дает возможность применять прямые методы. В некоторых случаях такой подход может быть достаточно простым [5], но эффективность его применения может быть значительно выше при автоматизации расчётов с использованием производительной вычислительной техники. Определение термодинамических параметров через свободную энергию – функционал вариационной задачи автоматически решает проблему термодинамической согласованности вариационного метода при моделировании процессов кристаллизации расплава.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ганиев Р.Ф. Нелинейные резонансы и катастрофы. Надежность, безопасность и бесшумность. М.: R&C Dynamics. 2013. 592 с
2. Бобровницкий Ю.И., Томилина Т.М. Научные основы создания упругих структур со специальными виброакустическими свойствами // Проблемы машиностроения и надёжности машин. 2014. №5. С. 3-11
3. Фантони И., Лозано Р. Нелинейное управление механическими системами с дефицитом управляющих воздействий [пер. с англ. В Шуликовской]. Ижевск : Компьютерная динамика, 2012. 312 с.
4. Дибров И.А. Состояние и перспектива развития литейного производства // Труды восьмого съезда литейщиков России. 2007. Т. 1. С. 3.
5. Пелих С.Г. Оптимизация металлоёмкости и надёжности литых деталей // Литейное производство. 2006. № 6. С. 8.
6. Пичунов М.В., Беляев И.В., Сидоров Е.В. Кристаллизация сплавов и направленное затвердевание отливок. Владимир: ВГУ. 2002. С.214.

**RESEARCH INTERESTS: THE STUDY AND FORMATION OF THE TECHNOLOGICAL SYSTEMS
OF PRODUCTION AND EXPLOITATION OF AEROSPACE ENGINEERING, STUDY SCHEMES
SELECTION OF MECHANICAL PROPERTIES OF STRUCTURAL MATERIALS**

Samara National Research University named after Academician S.P. Korolyov

© 2018 A.N. Koptev, S.F. Tlustenko

Experiments were conducted to establish the complex nature depending on the dislocation structure formed, the density distribution of the micropores and microcracks microdefects internal structure depending on the conditions of the melt crystallization. The characteristics of the resulting microstructures of structural steels for given operating conditions. For this purpose, with appropriate technical devices created external mechanical, acoustic, magnetic influence on the metal melt during its aging and crystallization. It was found that the scalar vector of increments of parameters crystallizing microstructures relative to the reference point in this case may be represented by tensors of the second rank: increments of linear and angular deformities. The kinetics of the growth of the emerging structure of crystals in the liquid metal melt at the moment of contact between the individual crystallized microparticles along their boundaries with the formation of crystallites with parameters depending on the crystallization conditions, which provides mathematical simulation of crystallization processes and allows to predict the chances of getting the guaranteed properties of the alloy structure, depending on the process conditions melting and crystallization of the melt,

Keywords: microstructure of structural materials, structural heterogeneity, the correlation between the parameters of their own and controlled anisotropy, the kinetics of microstructure formation, crystallization, phase composition, strength, ductility, temperature control.

*Anatoly Koptev, Doctor of Technics, Professor at the Institute
of Aeronautical Engineering.*

*Stanislav Tlustenko, Candidate of Technics, Associate
Professor at the Institute of Space Rocket Engineering.
E-mail: titan250@mail.ru*