

УДК 519.711.53:669.01

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ – СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

Кундас С. П.

*Международный государственный экологический университет им. А.Д.Сахарова,
Минск, Республика Беларусь,
kundas@iscu.by*

Введение. В последние годы, в связи с широким применением вычислительной техники почти во всех отраслях науки и техники, появилось новое научное направление, которое на языке-оригинале называется **Computational Materials Science**, что дословно можно перевести, как “вычислительное материаловедение” или материаловедение с применением компьютерного моделирования. Это научное направление объединяет в себе элементы материаловедения, физики, химии, математики, информатики, технической механики и других наук, которые являются основой для моделирования физических, химических и других процессов, определяющих структуру материалов и ее изменение в условиях внутренних и внешних воздействий. Стимулирующим фактором для развития этого направления являются все более широкое промышленное применение гибких автоматизированных производств.

Одна из наиболее сложных задач материаловедения – это исследование различных дефектов кристаллического строения материалов. Использование моделирования в этой области предоставляет также большую проблему, учитывая необходимость объединенного решения задач с разными временными и масштабными размерностями. Кроме этого, микроструктурные явления и изменения чаще всего нелинейны, что определяет сложность их математического описания и численного решения задач.

Для решения этих задач разработан ряд методов вычислительного материаловедения, которые позволяют эффективно соединить огромные масштабные расхождения и численно описывать взаимодействия дефектов структуры материалов [1]. Среди них можно отметить: метод ячеек автоматов (cellular automata), динамики дислокаций (dislocation dynamics), молекулярной динамики (molecular dynamic), Монте-Карло и др. [2].

Однако до настоящего времени отсутствует строгая теория, которая охватывала бы основные положения вычислительного материаловедения. Большинство разработанных методов решают относительно узкие задачи этого актуального направления науки, не всегда совместимы друг с другом, как по математической формализации физических процессов, так и по получаемым результатам.

Учитывая глобальное направление развития научно-технического прогресса в направлении сквозной автоматизации процессов проектирования и производства изделий, в ближайшие годы ожидается интенсивное развитие теории и практики вычислительного материаловедения, применения его результатов в промышленности, в том числе, при упрочнении и восстановлении деталей машин.

Общие подходы к применению методов компьютерного моделирования в материаловедении. Современное материаловедение основано на том, что свойства материалов определяются их химическим составом и микроструктурой. Это особенно характерно для механических свойств материалов. Поэтому применяемые методы анали-

за свойств материалов в значительной степени базируются на исследовании их микро-структуры, которая в свою очередь зависит от термодинамических неравновесных процессов, протекающих в материале. Следует отметить, что свойства материала определяют не те микро-структуры, которые являются близкими к равновесию, а те, которые имеют высокую неравновесность. Описание этих неравновесных состояний микро-структуры материалов является важной задачей вычислительного материаловедения. При этом необходимо тождественно связать макроскопическое поведение изделий с микро-структурой. Эта цель ставит задачу идентифицировать те дефекты структуры, включая их статическое и динамическое поведение, которое отвечает за специфические макроскопические свойства изделий.

Вычислительное материаловедение базируется также на пространственно-временной иерархии (рис. 1). Размеры моделируемых объектов могут изменяться от нанометров до миллиметров и метров (реальные изделия). С этими размерами связываются и моделируемые физические процессы (см. рис. 1, б), которые, соответственно, имеют длительность протекания от пикосекунд до секунд и более.

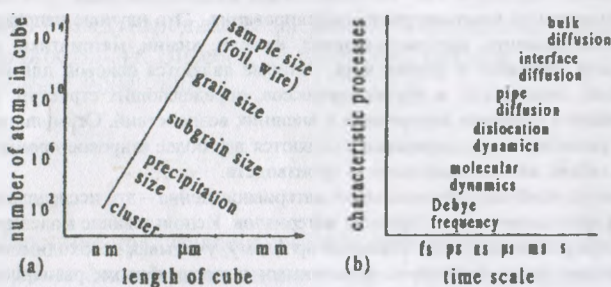


Рис. 1. Характерная длина и временные масштабы микро-структуры материалов (для единичного пространственного элемента-куба)

Исходя из приведенной пространственно-временной иерархии, уровни моделирования микро-структуры также разделены на макро-, мезо-, микро- и наноуровни [1, 2] (рис. 2). В этом контексте термин «макроскопический» относится к реальной геометрии изделий, «мезоскопический» – к дефектам кристаллического строения на уровне зерна, «микроскопический» – к дефектам кристаллического строения, ниже уровня зерна, и «наноскопический» – к уровню атомов. Конечно, это не строгое деление. Во многих случаях уровни могут объединяться и рассматриваться в едином контексте.

Как показано на рис. 2, на каждом из уровней применяются определенные методы моделирования, которые по своим возможностям соответствуют описываемым физическим процессам и пространственно-временному масштабу.

В общем случае моделирование микро-структуры предоставляет собой получение моделей, которые сформулированы на соответствующем уровне, описываемые с помощью систем алгебраических дифференциальных уравнений или с применением вероятностных методов, отражающих поведение рассматриваемых элементарных дефектов кристаллического строения с высокой степенью пространственной и временной дискретизации.

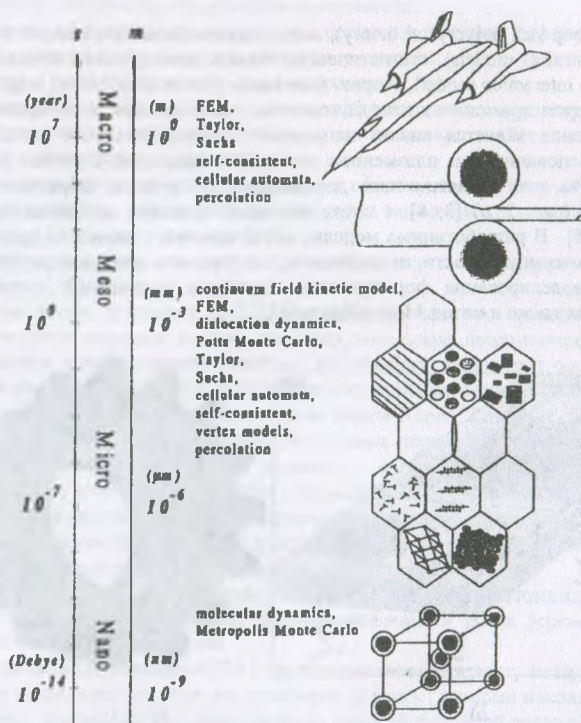


Рис. 2. Основные методы моделирования в зависимости от уровня иерархии

Особенности моделирования микроструктуры на разных уровнях иерархии.

Математической моделью микроструктуры на макро-уровне является система дифференциальных уравнений в частных производных. Для описания сложной формы материальной неоднородности на данном уровне используют дискретизацию пространства, т.е. исследуемое тело разбивается на ряд дискретных областей. В реальном моделировании свойств материалов количество этих дискретных областей может быть довольно большим, и модель будет состоять из большого числа дифференциальных уравнений в частных производных. В большинстве случаев такие сложные системы уравнений невозможно решить аналитическими методами.

Так как решение дифференциальных уравнений в частных производных может быть получено только для хорошо определённых граничных условий и начальных значений, то к основным методам моделирования на макро-уровне относят метод конечных элементов (моделирование больших деформаций) и метод конечных разностей (моделирование процессов диффузии и теплообмена и др.).

На макро-уровне, наряду с указанными выше универсальными методами, применяются также специализированные модели пластической деформации поликристаллических материалов, к которым можно отнести: обобщённую полную модель напряжений Тейлора (Taylor full constraints model), поликристаллическую теорию Бишоп —

Хилла (Bishop-Hill polycrystal theory), модели релаксации напряжений Тейлора (Taylor relaxed constraints models), статистическую модель межзеренного взаимодействия (Statistical grain interaction model), теорию фιλтатции (Percolation theory) и др. [1, 2].

Примером применения метода конечных элементов для моделирования задач материаловедения является анализ напряженно-деформированного состояния системы покрытие-основание при плазменном напылении покрытий с учетом релаксации напряжений за счет пластических деформаций, ползучести, образования трещин и расслоений (рис. 3, а) [3, 4], а также при моделировании процессов термообработки (рис. 5, б) [5]. В разработанных моделях метод конечных элементов применен для описания задач термоупругости, пластичности, ползучести и механики разрушения.

Для моделирования формирования структуры плазменных покрытий успешно применяется также и метод Монте-Карло [6].

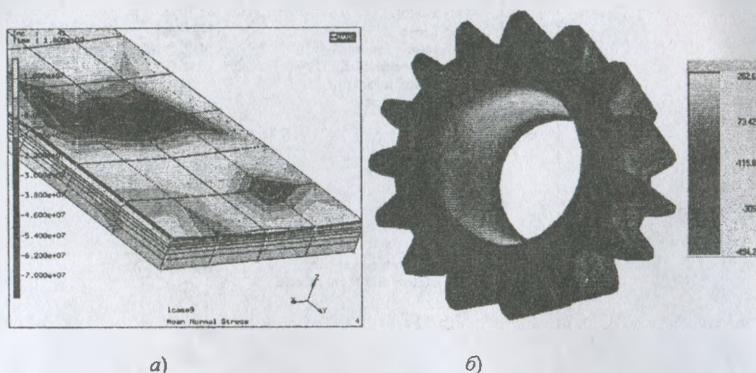


Рис. 3. Результаты моделирования распределения напряжений:

- а) – в плазменных покрытиях (Па); б) – в стальной шестерне после закалки (МПа), с применением метода конечных элементов.

Исследование и прогнозирование изменения микроструктуры на микроуровне (мезоуровне) является наиболее широкой областью применения вычислительного материаловедения. Структурные изменения на этом уровне чаще всего термодинамически неравновесны и зависят от кинетики протекающих физических процессов. Другими словами, термодинамика предсказывает главные направления изменения структуры, а с помощью кинетики уточняется один или несколько вариантов ее развития. Исследование и оптимизация микроструктуры на этом уровне играет большую роль в материаловедении, так как является основой для управления и прогнозирования структурно-зависимых свойств материалов.

Цель моделирования на данном уровне – это описание поведения индивидуальных дефектов кристаллического строения материалов с дискретизацией расчетных процедур во времени и пространстве. Для этих целей используются упомянутые модели мезоуровня с их адаптацией для единичных дефектов. Однако, наиболее широкое применение нашли более специализированные модели, а именно: модель клеточных автоматов (cellular automata) [7], динамики дислокаций (dislocation dynamics) [8], сетевые или узловые модели (network (vertex) models) [1,2].

Эти три метода имеют следующие общие особенности:

- 1) моделирование осуществляется численным решением системы дифференциальных уравнений с использованием метода конечных разностей;
- 2) они дискретны как в пространстве, так и во времени;
- 3) микроскопический подход, основанный на дифференциально – разностных уравнениях, которые описывают статистические и динамические свойства элементарных дефектов кристаллического строения;
- 4) они моделируют микроструктуру, описывая и объясняя много явлений взаимодействия (взаимодействие дефектов на границе зерна, примесей, сегментов дислокации и т.д.);
- 5) применяются детерминированные и статистические методы моделирования.

Метод клеточных автоматов [1,2,7] описывает дискретное пространственное и временное поведение сложных систем, применяя локальные детерминированные или случайные правила преобразования решетки. Эти правила определяют состояние объекта, как функции от предыдущего состояния и состояния соседних объектов. Последний метод в некоторой степени схож с методом Монте-Карло. Различие заключается в том, что в методе Монте-Карло модификация фазовых переменных происходит последовательно, в то время как в клеточных автоматах – одновременно. Каждый узел должен принять одно из конечного множества возможных дискретных состояний. Локальные взаимодействия соседних мест определяются через набор детерминированных или случайных правил взаимодействия (при детерминированном моделировании – на основе физических законов, определяющих взаимодействие).

Наиболее широкое применение модели на основе клеточных автоматов нашли при исследовании явлений восстановления, рекристаллизации и роста зерен, а также в диффузионных фазовых превращениях.

Методы динамики дислокаций [2,8] представляют собой группу методов, которые описывают дислокации вне их ядер как линейные дефекты, которые находятся в какой либо гомогенной, изотропной или анизотропной, упругой линейной среде рассматривая время и фактическое положение каждого дефекта как независимые переменные. Моделирование может быть двумерным и трёхмерным. Поведение дислокаций обычно описывается с помощью феноменологических вязких или вязкопластических законов течения или на основе применения второго закона Ньютона для каждой дислокации с определением текущего положения дислокаций на основе алгоритмов метода конечных разностей.

Сетевые методы (в основном, 2D) [1,2] применяются для топологического моделирования сетей дислокаций во взаимосвязи со структурой зерен и субзерен. В этих методах стенки ячеистых дислокаций и большеугловые границы зерен обрабатываются как линейные дефекты, которые реорганизуются в зависимости от внешних нагрузок, кривизны интерфейсных линий и запасенной энергии. Результирующее движение границы зерна (описывается также конечноразностным алгоритмом) происходит в соответствии с возникающей в сети результирующей силы и подвижности границ, учитывая законы вязкого течения. Модели обычно рассматривают равновесие линейных напряжений в узлах и сохранение их связанности.

Для моделирования на наноуровне (на атомном уровне) в вычислительном материаловедении наиболее широкое применение находит известный метод Монте-Карло [1,2] и метод молекулярной динамики [1,2].

Как известно, Монте-Карло метод – это вероятностный метод, применяемый к статистической физике и механике для численного решения многомерных интегральных уравнений. В вычислительном материаловедении он применяется для расширения модели кристаллической решетки Исинга (Ising lattice model), первоначально разрабо-

танной для математического описания магнитных доменов. Применительно к кристаллической решетке в этой модели внутренняя энергия системы описывается, как сумма энергий парного взаимодействия между элементарными модулями (например, атомами или молекулами). Метод Монте-Карло моделирует только термодинамические процессы и не рассматривает микроскопическую динамику.

В отличие от алгоритмов Монте-Карло, метод молекулярной динамики является детерминированным и описывает индивидуальные движения молекул или атомов. Этот метод исходит из того, что максимальное число взаимодействующих атомов и молекул определяется межатомным потенциалом, который является функцией относительного положения двух или более атомов. Полная потенциальная энергия массива атомов соответствует сумме всех энергий межатомного взаимодействия. Для получения межатомного потенциала решаются уравнения Шредингера. Затем составляются интегральные уравнения движения для атомных систем, которые решаются методом конечных разностей. Пример использования некоторых методов вычислительного материаловедения, для моделирования пластической деформации кристаллических материалов показан на рис. 4.

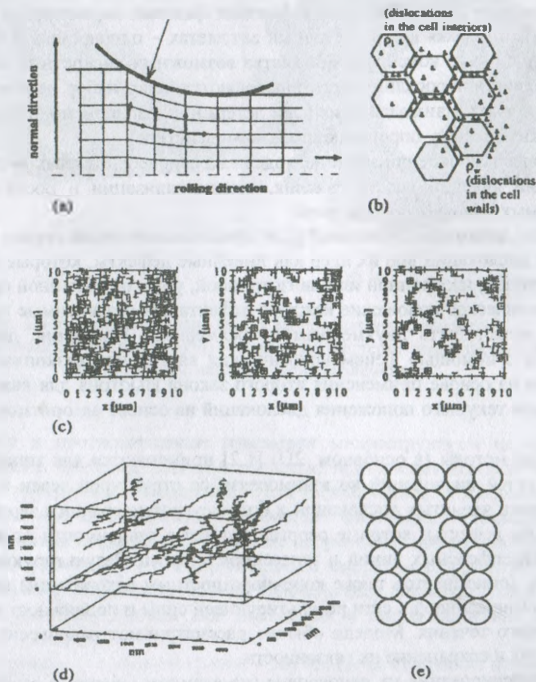


Рис. 4. Схемы и результаты моделирования пластических деформаций кристаллических материалов на разных уровнях: (а) двухмерное моделирование с помощью МКЭ на макроуровне; (б) статистическое кинематическое моделирование межзеренных и внутризеренных дислокаций, основанное на моделях Kocks, Mecking, Mughrabi и Estrin; (в) двухмерная модель динамики дислокаций; (д) трехмерная модель динамики дислокаций, (е) моделирование с применением молекулярной динамики [2].

Направления дальнейшего развития методов компьютерного моделирования в материаловедении. Важным направлением дальнейшего развития методов вычислительного материаловедения является устранение пробелов в моделировании микроструктур различного уровня (от макроскопических до наноскопических). Для этого осуществляется разработка и использование в этой области новых методов компьютерного моделирования, способных решать вычислительные задачи в широких диапазонах времени и пространства, а также более совершенных численных методов решения дифференциальных уравнений, задач теории вероятности и математической статистики. Примером этому может служить метод клеточных автоматов, который теоретически может охватить большой масштаб, от макро- до наноуровня.

Другое направление развития вычислительного материаловедения основывается на концепции интегрированного моделирования. Эта концепция предусматривает организацию взаимосвязи между различными методами, применяемыми на соответствующем уровне иерархии микроструктуры, с целью сквозного моделирования всех процессов, определяющих микроструктурные изменения в материалах и их свойства. Это может быть достигнуто путём прямого или последовательного интегрирования. Прямое интегрирование означает, что различные взаимодействующие уровни моделирования микроструктуры используются в одном компьютерном эксперименте, даже применяя различные методы моделирования. Последовательное интегрирование предусматривает сквозную передачу данных результатов моделирования от одного уровня, на последующие.

Одним из примеров такого подхода является моделирование процессов восстановления и рекристаллизации в сплавах, где для оценки кинетики восстановления применяется двухмерная модель динамики дислокаций, а на заключительных этапах (описания микроструктуры) используется метод клеточных автоматов.

В соответствии с повышением вычислительных мощностей современных компьютеров, совершенствуются и рассмотренные выше классические методы моделирования (клеточные автоматы, молекулярная динамика и др.). Это совершенствование идет, прежде всего, в направлении увеличения размерности моделей (применение трехмерных моделей), повышения точности результатов моделирования за счет уменьшения временной и пространственной дискретизации, моделирования в реальных временных масштабах, широкого использования методов графической анимации протекающих процессов. В последние годы наблюдается также тенденция к "интеллектуализации" моделирующих систем за счет включения в их состав экспертных систем и других элементов систем искусственного интеллекта (например, нейронных сетей) [9].

Большое внимание уделяется также применению результатов вычислительного материаловедения в реальном производстве, для проектирования процессов обработки материалов различными методами, при построении гибких автоматизированных производств.

Основные научные и технические достижения в этой области освещаются в периодическом журнале «Computational Materials Science» [7] издательства [ELSIIVIER \(www.elsevier.com\)](http://www.elsevier.com)

Список литературы

1. Mark J., Glicksmann M., March S. Computational methods in material science. MRS, 1992.- 418.
2. Klímanek P., Pantleon W. Simulationstechniken in der Materialwissenschaft. Technische Universität Freiburg, 1997.-348.
3. Процессы плазменного нанесения покрытий: теория и практика / А.Ф. Ильющенко, С.П. Кудас, А.П. Достанко Lugscheider, U. Eritt.: Под общ. ред. акад. НАН Беларуси А.П. Достанко, П.А. Витязя. – Мн.: Армита, 1999.- 544 с.

4. Кундас С.П., Марковник Д.В., Кашко Т.А. Применение математических методов и программных средств для моделирования напряженно-деформированного состояния плазменных покрытий /Известия Белорусской инженерной академии, 2004 г., №1(17)1 - с. 85-87.
5. Кундас С.П., Тонконогов Б.А., Гишкелюк И.А., Гурченко П.С. Компьютерное моделирование и исследование процесса закалки / Доклады Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, 2003 г. Том.1, № 3. с. 65-71.
6. Плазменные процессы в производстве изделий электронной техники. В 3 т. Т. 1/ А.П. Достанко, С.П. Кундас, С.В.Бордусов и др.; Под общ ред. акад. НАН Беларуси А.П. Достанко. – Мн.: ФУАинформ, 2000.- 424 с.
7. Wolfram S. Theory and application of cellular automata. World Science Publication, 1986. – 546.
8. Raabe D. Introduction of hybrid model for the discrete 3D simulation of dislocation dynamics. Computational Materials Science, 1998. No.11. P.1-15.
9. Kundas S.P., Levashkevich Y.S., Ilyushenko A.F. Hybrid Expert Systems Implementation for the Research and Optimization of Coating Plasma Spraying Processes/ IV International Conference "Plasma physics and plasma technology", Minsk, Belarus, September 15-19, 2003, p.591 - 594.
10. Computation Materials Science. Elsevier Science B.V., 1993-2004.

УДК 621.78.011:681.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ И ТВЕРДОСТИ СТАЛЬНЫХ ДЕТАЛЕЙ ПРИ ЗАКАЛКЕ

Кундас С. П.¹⁾, Тонконогов Б. А.²⁾, Гишкелюк И. А.²⁾

¹⁾ *Международный государственный экологический университет им. А.Д.Сахарова, Минск, Республика Беларусь, kundas@iseu.by*

²⁾ *Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь, adminset@bsuir.unibel.by*

Введение. Процесс закалки в настоящее время широко применяется в различных отраслях промышленности для повышения эксплуатационных свойств металлических деталей. При закалке стальных деталей в них возникают напряжения вследствие неоднородности температурного поля и неравномерного протекания фазовых превращений [1]. В связи с этим, актуальна задача выбора режима охлаждения при закалке, обеспечивающего, наряду с требуемой структурой и твердостью, допустимый уровень напряжений. Трудоемкость экспериментального исследования остаточных напряжений после закалки, а также невозможность в настоящее время экспериментально исследовать кинетику напряженно-деформируемого состояния (НДС) при закалке, вызывает необходимость построения математической модели для расчетного определения напряженно-деформируемого состояния при закалке стальных деталей [2].

В статье представлена математическая модель процесса печной закалки стальных деталей, обеспечивающая прогнозирование их напряженно-деформируемого состояния при произвольном охлаждении с учетом теплоты превращения и изменения удельного объема стали при фазовых превращениях, и проведено моделирование формирования напряжений в деталях при заданных условиях охлаждения.