

РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЕРОЯТНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ И УПРУГИХ СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА

А. А. ВОДКА, А. А. ГАМАЮНОВА*, С. В. ЛЕЛЕКА

Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», Харьков, УКРАИНА
*email: anastasia.0221@yandex.ru

АННОТАЦИЯ В роботі розглянуті питання розробки інтегрованого програмного забезпечення для дослідження ймовірнісних характеристик напруженого стану, пружних властивостей полікристалічного матеріалу на прикладі чистої міді. У статті використано розбиття Вороного для побудови геометричної моделі полікристалічного матеріалу. Для побудови скінчено-елементних моделей використані геометричні моделі. Механічні властивості кожного кристала враховують анізотропію його механічних властивостей. Ймовірнісні характеристики визначалися методом Монте-Карло.

Ключові слова: комп'ютерна система, полікристалічний матеріал, розбиття Вороного, метод Монте-Карло, ймовірнісні характеристики, напружений стан

АННОТАЦИЯ В работе рассмотрены вопросы разработки интегрированного программного обеспечения для исследования вероятностных характеристик напряженного состояния, упругих свойств поликристаллического материала на примере чистой меди. В статье использовано разбиение Вороного для построения геометрической модели поликристаллического материала. Для построения конечно-элементных моделей использованы геометрические модели. Механические свойства каждого кристалла учитывают анизотропию механических свойств. Вероятностные характеристики определялись методом Монте-Карло.

Ключевые слова: компьютерная система, поликристаллический материал, разбиение Вороного, метод Монте-Карло, вероятностные характеристики, напряженное состояние

DEVELOPMENT OF THE COMPUTER SYSTEM FOR INVESTIGATIONS OF THE PROBABILITY CHARACTERISTICS OF THE STRESS STATE AND THE ELASTIC MODULI OF THE POLYCRYSTALLINE MATERIALS

O. VODKA, A. HAMAIUNOVA*, S. LELEKA

National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, UKRAINE

ABSTRACT Metallic materials are widely used in industry. Such materials have well-studied mechanical properties. Most of metallic materials in the macro scale has isotropic characteristics. Consideration of these materials at the micro level shows that they have a complex polycrystalline structure. Each crystal in this structure has a random position in space, anisotropic mechanical properties with an arbitrary orientation of the axes. This leads to considerable jumps in a stressed state at the grain boundaries, which are also random. In order to predict the reliability of polycrystalline materials is important to get the stress state in the grain boundary. To define it, it has been used the finite element method, a geometric model of the microstructure of the material was built with the Voronoi tessellation. Probability characteristics of the stress state determined by the Monte-Carlo method. To implement this method special software was developed. This software builds geometric model, performs calculation and process results.

As a result, the probability characteristics have been determined the minimum, average and maximum stresses in the microstructure of the material and the technique of obtaining averaged isotropic elastic characteristics of the material. Numerical values of the elastic constants obtained for pure copper, in good agreement with the reference data.

Keywords: computer system, polycrystalline material, Voronoi tessellation, Monte-Carlo simulation, probability characteristics, stress state

Введение

Металлические материалы широко применяются в машиностроении. Такие материалы имеют достаточно сложное внутреннее строение, и в макроскопическом масштабе обладают изотропными (не зависящими от направления) механическими свойствами [1]. При рассмотрении материала на микроуровне наблюдается значительное отклонение

его упругих свойства от изотропных, а их величина определяется строением материала. На микроуровне металлические материалы представляют собой поликристаллическую структуру, причем каждый кристалл имеет свою ориентацию в пространстве [2]. Каждый кристалл поликристаллической структуры обладает анизотропными (зависящими от направления) механическими свойствами, характерным всем кристаллам. Анизотропия свойств

и различная ориентация кристаллов при объединении их в поликристаллическую структуру сглаживаются, образуя изотропную в макро объеме структуру [1, 2].

При проведении расчетов на прочной в инженерной практике рассматриваемые материалы на макроуровне традиционно моделируются как изотропные. Такой подход позволяет получить приемлемые для инженерных задач результаты. Однако учет поведения материала на микроуровне позволяет оценить скачки в напряженном состоянии, возникающие между кристаллами. Именно они являются источниками микро и макротрещин.

Еще одной особенностью моделирования материала на микроуровне является отсутствие информации о положении и ориентации кристаллов, так как они зависят от многих факторов, таких как: технология литья, закалки, механической обработки и прочее. Поэтому целесообразно считать положение и ориентацию кристаллов случайными величинами.

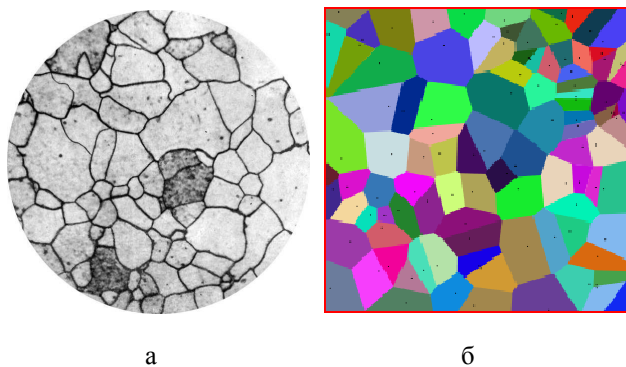


Рис. 1 – Микроструктура протравленной меди и разбиение Вороного для случайного множества точек: а – типовая микроструктура материала; б – разбиение Вороного

Для построения геометрических моделей поликристаллической структуры материала на микроуровне широко используется разбиение Вороного [3, 4, 5]. Это разбиение строится по набору координат точек в трехмерном пространстве, которые показывают центры начала кристаллизации. Далее относительно этих центров выделяются области, которые ближе к одному из центров, чем ко всем остальным. На рис. 1а приведена типовая микроструктура материала, а на рис. 1б показано типовое разбиение Вороного, которое в значительной мере обладает сходством с рис. 1а.

Постановка задачи

Принимая во внимание случайное положение кристаллов и ориентацию их главных осей, для определения напряженно-деформированного состояния (НДС) выделяют репрезентативный объем,

который обладает свойствами макроуровня, но сконструирован на основе принципов микроуровня. Так как такой объект имеет случайную структуру, то и напряженное состояние будет также случайным. Для определения вероятностных характеристик напряженного состояния такого объекта часто используют метод типа Монте-Карло. Этот метод подразумевает многократное решение детерминированной задачи со случайными исходными данными. Применение данного метода требует создания интегрированной компьютерной системы для моделирования микроструктуры материала с помощью разбиения Вороного.

Таким образом, в работе необходимо разработать интегрированную компьютерную систему для моделирования микроструктуры материала, которая позволяет оценить вероятностные характеристики напряженного состояния микроструктуры материала, получить осредненные параметры материала, выполнить их сравнение с уже полученными ранее результатами.

Разработка управляющей программы

Для написания управляющей системы был выбран язык C# и платформа .NET [6]. Для построения геометрической модели и расчета НДС использован программный комплекс ANSYS [7, 8]. Все операции по построению модели были проведены с использованием языка APDL. Для построения 3D геометрической модели ячейки Вороного была использована библиотека voro++ [9].

Перед началом построения геометрической модели необходимо сгенерировать координаты точек центров каждого зерна, затем, используя функции библиотеки voro++, получить вершины разбиения Вороного.

Используя полученные данные, сгенерируем макрос на языке APDL. Этот макрос включает в себя такие этапы:

1. Построение вершин и центров зерен;
2. Построение ребер зерен путем соединения вершин (рис 2а);
3. Линии, входящие в одно зерно, объединим в поверхности, а их в объемы (рис. 2б). На рисунке изображена внутренняя часть куба, исключая несколько внешних зерен;
4. Каждому объему присвоим систему координат, углы поворота которых сгенерированы случайным образом. (рис. 2в);
5. Для создания конечно-элементной (КЭ) модели и построения КЭ сетки используется 4-х узловой конечный элемент с тремя степенями свободы в узле. КЭ модель приведена на рис. 2в;
6. В качестве граничных условий на нижней поверхности куба запрещены перемещения по оси Y. Для стабилизации решения в точке,

находящейся в центре координат, запрещены все перемещения. На верхнюю грань куба приложено давление в размере 1 МПа (рис. 2г).

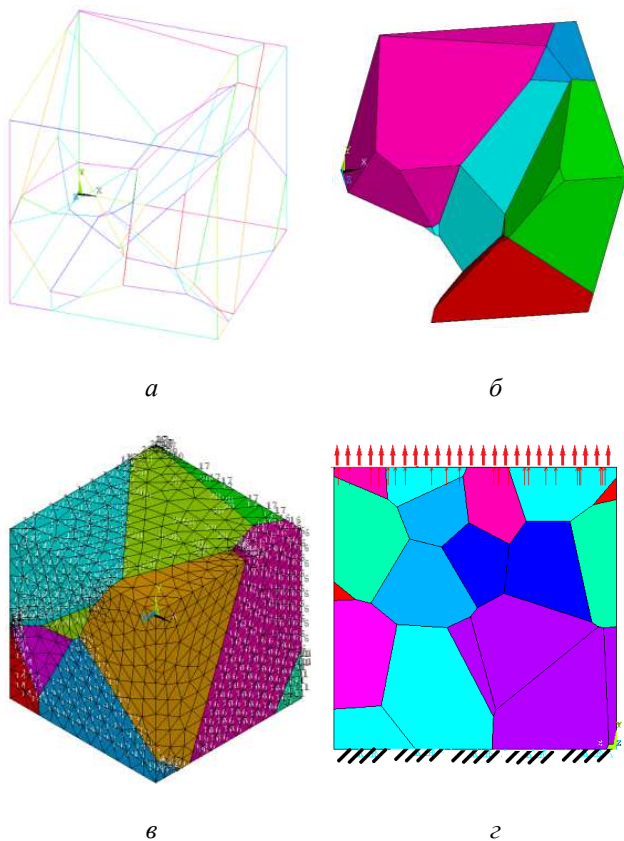


Рис. 2 – Этапы построения модели:
а, б – геометрические модели; в – КЭ сетка;
г – граничные условия

После построения модели производится статический расчет НДС. Согласно методу Монте-Карло это расчет повторяется 100 раз. При этом каждый раз генерируются новые центры кристаллизации и ориентация кристаллов, а библиотека voro++ каждый раз генерирует новое разбиение Вороного.

Разработка пользовательского интерфейса

Проектирование интерфейса проводилось в интегрированной среде разработки Microsoft Visual Studio 2013 с использованием технологии Windows Forms [10]. Программа состоит из одного главного окна, двух дополнительных вкладок, полей для ввода и выбора данных, поля для отображения результатов. На рис. 3 представлен внешний вид программного продукта.

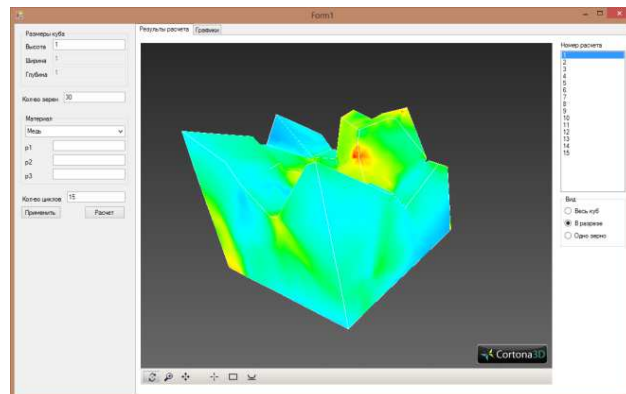


Рис. 3 – Внешний вид программного продукта

На рис. 4 приведен алгоритм работы программного продукта

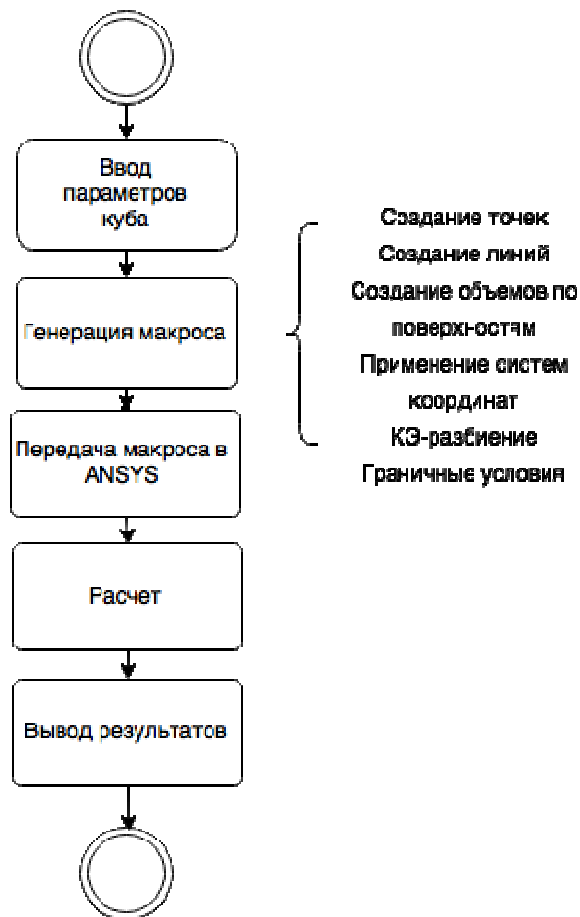


Рис. 4 – Алгоритм работы программы

Основные принципы работы программы

Разработанная программа имеет следующие возможности:

1. Изменение размеров репрезентативного объема (куба);
2. Варьирование количеством зерен в репрезентативном объеме;

3. Выбор материала. Константы материала определяются пользователем;
4. Количество итераций метода Монте-Карло.

После ввода необходимых параметров активируется кнопка «Применить», после нажатия, на которую проводится запись всех параметров в файл настроек. При нажатии на кнопку «Расчет» последовательно запускаются расчеты, количество которых соответствует введенному значению.

В соответствии с записанными данными при каждом расчете генерируется макрос, таким образом, чтобы параметры куба, соответствующие считанным настройкам, на протяжении цикла остаются постоянными, а параметры зерен: расположение и форма на каждом шаге цикла изменяются.

В правой части вкладки «Результаты расчета» находится список проведенных расчетов, который показывает напряженно-деформированное состояние куба при разном его строении. Ниже можно выбрать тип отображения модели. В данной программе, ячейка может отображаться в трех видах: весь куб, куб в разрезе и вид одного зерна.

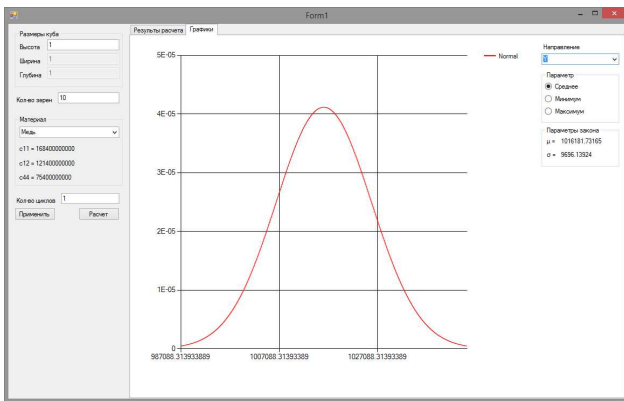


Рис. 5 – Внешний вид вкладки «Графики»

Вкладка «Графики» (рис. 5), позволяет просматривать результаты определения плотности вероятности. Справа, в выпадающем списке, можно выбрать направление напряжения, модуль упругости и коэффициент Пуассона.

Среднее напряжение – это математическое ожидание всех средних напряжений для каждого расчета. Минимальное (максимальное) напряжение – это математическое ожидание всех минимальных (максимальных) напряжений для каждого расчета.

В блоке «Параметры закона» показаны полученные значения математического ожидания и среднего квадратичного отклонения.

Взаимодействие пользователя с разработанным программным продуктом можно представить в виде диаграммы прецедентов (рис. 6).



Рис. 6 – Диаграмма прецедентов

Тестирование программного продукта

Тестирование работы программного продукта проводилось на примере чистой меди. Кристаллы чистой меди обладают кубической гранецентрированной решеткой с упругими константами $c_{11} = 168,4$ ГПа, $c_{12} = 121,4$ ГПа, $c_{44} = 75,4$ ГПа.

Согласно методу Монте-Карло проведем серию расчетов и усредним результаты. Для этого в главном окне программы выберем исследуемый материал, а количество расчетов зададим равным 100. Программа выполнит 100 итераций и выведет все необходимые данные на экран. На вкладке «Результаты расчетов» приводится список расчетов, при нажатии на который, можно увидеть напряженно-деформированное состояние для каждой итерации. Также можно изменить внешний вид отображения. На рис. 7 изображено НДС, возникающие в зернах и на их границах.

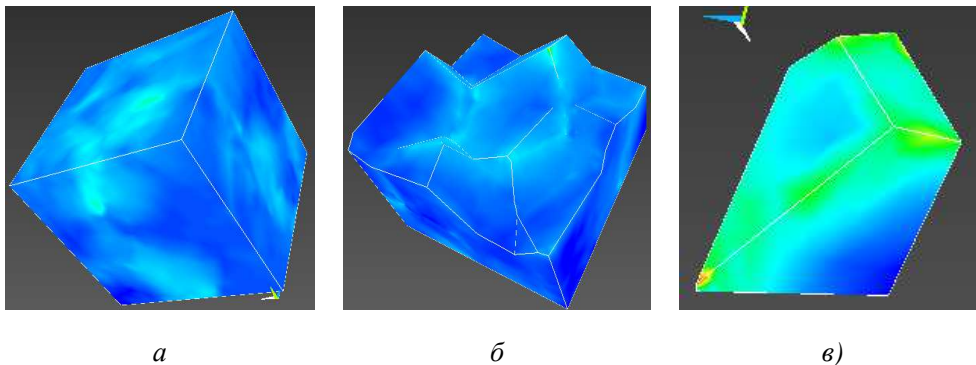


Рис. 7 – НДС в репрезентативном объеме:
а – весь куб, б – в разрезе, в – одно зерно

Обработка результатов

По результатам работы программы были построены гистограммы, нормированных по нагрузке, минимальных (рис. 8а), средних (рис. 8б) и максимальных (рис. 8в) напряжений [11]. Согласно теореме Фишера-Типпетта-Гнеденко [12], минимальные и максимальные напряжения подчиняются обобщенному экстремальному распределению (1), а средние напряжения согласно центральной предельной теореме подчиняются нормальному закону (2), где ζ – нормированная случайная величина (3), k , s , μ – параметры распределения.

Для полученных распределений были определены математическое ожидание (МО) (4) и дисперсия (5). Полученные результаты сведены в табл. 1.

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{s} \exp(-(1+k\zeta)^{-1/k}) (1+k\zeta)^{-1-1/k} & k \neq 0 \\ \frac{1}{s} \exp(-\zeta - \exp(-\zeta)) & k = 0 \end{cases}, \quad (1)$$

$$f(x) = \frac{1}{s\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right), \quad (2)$$

$$\zeta = \frac{x - \mu}{s}, \quad (3)$$

$$M[x] = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx, \quad (4)$$

$$\text{var}[x] = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - M[x])^2 f(x) dx. \quad (5)$$

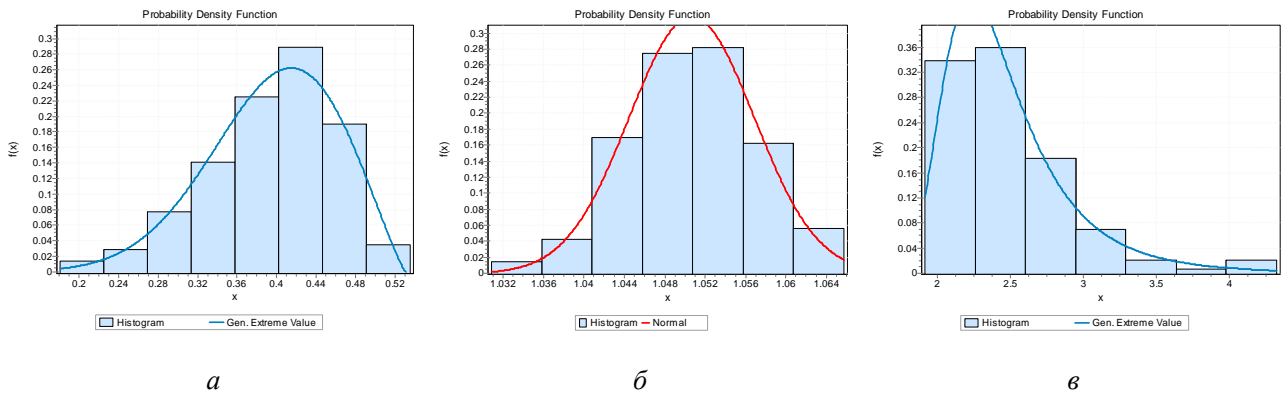


Рис. 8 – Гистограммы и аппроксимирующие их законы: а – минимальных; б – средних; в – максимальных напряжений

Табл. 1 – Параметры законов распределения и их вероятностные характеристики

поз. рис. 10	μ	k	s	$M[x]$	$\text{var}[x]^{1/2}$
а	0.377	-0.45845	0.07029	0.39459	0.00431
б	1.050	–	0.00621	1.0507	0.00621
в	2.273	0.13787	0.29101	2.4865	0.46558

Из анализа полученных результатов (табл. 1) видно, что МО минимальных напряжений в 2,66 раза меньше, чем МО средних напряжений. А МО максимальных напряжений в 2,33 раза больше средних. Таким образом, отклонения максимальных и минимальных напряжений по отношению к средним – весьма значительны. Анализируя среднеквадратичное отклонение (СКО) напряжений, можно сделать вывод, что минимальные и средние напряжения обладают незначительным разбросом по отношению к МО. Однако СКО максимальных напряжений на два порядка больше, чем для других напряжений, что свидетельствует о значительном разбросе максимальных напряжений.

С помощью полученных данных о напряженно-деформируемом состоянии ячейки были определены осредненные изотропные характеристики материала. Для этого были найдены средние по объему компоненты тензоров напряжений (σ) и деформаций (ϵ), через которые были выражены осредненный объемный (K) и сдвиговой (G) модули [13]:

$$K = \frac{1}{3} \frac{\sigma_1}{\epsilon_1}, \quad (6)$$

$$G = \frac{1}{3} \frac{\sigma_i}{\epsilon_i}, \quad (7)$$

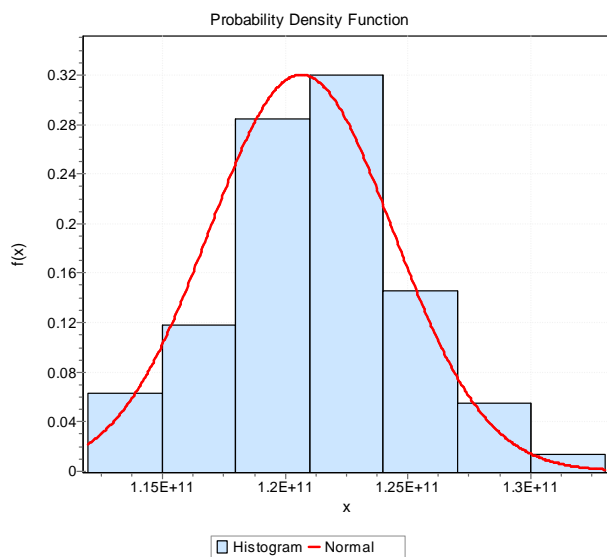
где σ_1 и ε_1 – средние первые главные напряжения и деформации, соответственно, σ_i и ε_i – средние эквивалентные напряжения и деформации по Мизесу, соответственно.

Из этих двух модулей могут быть найдены модуль упругости E и коэффициент Пуассона ν [13]:

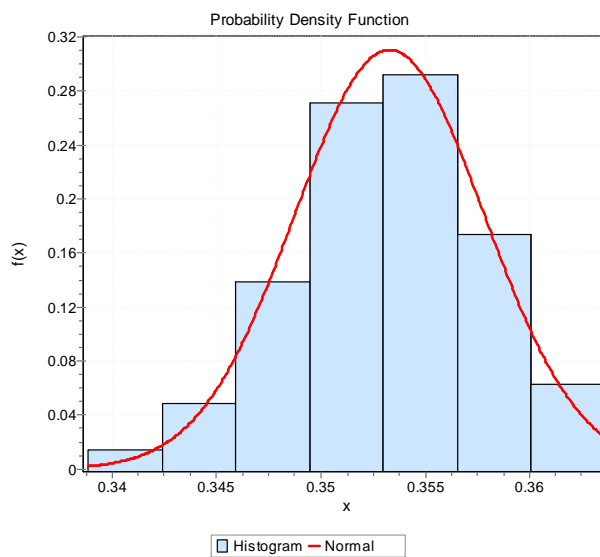
$$E = \frac{9KG}{3K + G}, \quad (8)$$

$$\nu = \frac{3K - 2G}{6K + 2G}. \quad (9)$$

Определив модуль упругости и коэффициент Пуассона на каждой итерации метода Монте-Карло можно определить их вероятностные характеристики. В силу центральной предельной теоремы E и ν должны подчиняться нормальному закону.



a



б

Рис. 9 – Гистограммы и аппроксимирующий их нормальный закон:
a – модуль упругости, *б* – коэффициент Пуассона

Полученные значения модуля упругости и коэффициента Пуассона представлены в табл. 2, из которой видно, что среднее значение соответствует справочным данным [13]. Также построены кривые распределения для этих характеристик, показывающая разброс возможных значений (рис. 9).

Табл. 2 – Вероятностные характеристики модуля упругости и коэффициента Пуассона

Параметр	Значение
$M[E]$, ГПа	120,6
$\text{var}[E]^{1/2}$, ГПа	3,73
$M[E] \pm 3\text{var}[E]$, ГПа	$120,6 \pm 11,2$
$M[\nu]$	0,353
$\text{var}[\nu]^{1/2}$	$4,54 \times 10^{-3}$
$M[\nu] \pm 3\text{var}[\nu]$	$0,353 \pm 0,013$

Выводы

В работе выполнено исследование вероятностных характеристик напряженного состояния и упругих свойств материала. Разработана интегрированная компьютерная система для

моделирования микроструктуры материала. Построена КЭ-модель ячейки Вороного. Выполнен расчет НДС модели. Получены оценки вероятностных характеристик напряжений в ячейке. Сравнение исходных значений модуля упругости и коэффициента Пуассона с полученными в результате работы показало хорошее соответствие результатов.

Анализ вероятностных характеристик напряженного состояния ячейки показал, что наибольшими разбросом обладают максимальные напряжения. Причем МО максимальных напряжений в 2,33 раза превышает МО средних напряжений. Также именно максимальные напряжения обладают наибольшей дисперсией.

Результаты по определению изотропных упругих констант для чистой меди показали, что известные результаты лежат внутри доверительного интервала, полученного в результате расчета, что свидетельствует о корректности построенных моделей.

Список литературы

1. Honeycombe, R. W. K. The Plastic Deformation of Metals / R. W. K. Honeycombe – E. Arnold. – 1984. – 483с.

2. **Nye, J. F.** Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices / **J. F. Nye.** – Clarendon Press. – 1985. – 329с.
3. **Ozhoga-Maslovskaja, O.** Micromechanical simulation of grain boundary cavitation in copper considering non-proportional loading / **O. Ozhoga-Maslovskaja, K. Naumenko, H. Altenbach, O. Prygorniev** // *Comput. Mater. Sci.* – 2015. – Т. 96 – 178-184с.
4. **Fritzen, F.** Periodic three-dimensional mesh generation for crystalline aggregates based on Voronoi tessellations / **F. Fritzen, T. Böhlke, E. Schnack** // *Comput. Mech.* – 2008. – Т. 43 – № 5 – 701-713с.
5. **Simonovski, I.** Towards modeling intergranular stress corrosion cracks on grain size scales / **I. Simonovski, L. Cizelj** // *Nucl. Eng. Des.* – 2012. – Т. 246 – 107-114с.
6. **Troelsen, A.** Pro C# 5.0 and the .NET 4.5 Framework / **A. Troelsen** – Apress. – 2012. – 1560с.
7. **Lawrence, K. L.** ANSYS Workbench Tutorial Release 14 / **K. L. Lawrence** – SDC Publications. – 2012. – 291с.
8. **Басов, К.** ANSYS. Справочник пользователя / **К. Басов** – ЛитРес. – 2014.
9. **Rycroft, C. H.** VORO++: a three-dimensional voronoi cell library in C++. / **C. H. Rycroft** // *Chaos* – 2009. – Т. 19 – № 4 – 411с.
10. **Johnson, B.** Professional Visual Studio 2013 / **B. Johnson** – John Wiley & Sons. – 2014. – 1104с.
11. **Coles, S.** An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values / **S. Coles** – 2001.
12. **Игоревич, И. Р.** Теория вероятностей и математическая статистика. Основы, прикладные аспекты с примерами и задачами в среде Mathcad / **И. Р. Игоревич** – БХВ-Петербург. – 2008. – 528с.
13. **Rattan, S. S.** Strength of Materials / **S. S. Rattan** – Tata McGraw-Hill Education. – 2008. – 585с.

Bibliography (transliterated)

1. **Honeycombe, R. W. K.** The Plastic Deformation of Metals. - E. Arnold. – 1984. – 483 s.
2. **Nye, J. F.** Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices / *Clarendon Press.* – 1985. – 329 s.
3. **Ozhoga-Maslovskaja, O., Naumenko, K., Altenbach, H., Prygorniev, O.** Micromechanical Simulation of Grain Boundary Cavitation in Copper Considering Non-Proportional Loading / *Computational Materials Science.* – № 96. – 2015. – S. 178-184.
4. **Fritzen, F., Böhlke, T., and Schnack, E.** Periodic Three-Dimensional Mesh Generation for Crystalline Aggregates Based on Voronoi Tessellations / *Computational Mechanics* – 2008. – № 43.5. – S. 701-713.
5. **Simonovski, I., Leon, I.** Towards Modeling Intergranular Stress Corrosion Cracks on Grain Size Scales / *Nuclear Engineering and Design* 246. – 2012. – S. 107-114.
6. **Troelsen, A.** Pro C# 5.0 and the .NET 4.5 Framework / *Apress.* – 2012. – 1560 s.
7. **Lawrence, K. L.** ANSYS Workbench Tutorial Release 14. / *SDC Publications.* – 2012. – 291 s.
8. **Basov, K.** ANSYS. Spravochnik Pol'zovatelja / *LitRes,* 2014.
9. **Rycroft, C. H.** VORO++: A Three-Dimensional Voronoi Cell Library in C++ / *Chaos (Woodbury, N.Y.)* 19.4. – 2009. – 411 s.
10. **Johnson, B.** Professional Visual Studio 2013 / *John Wiley & Sons.* – 2014. – 1104 s.
11. **Coles, S.** An Introduction to Statistical Modeling of Extreme Values. N.p. – 2001.
12. **Igorovich, I. R.** Teorija Verojatnostej I Matematicheskaja Stati-stika. Osnovy, Prikladnye Aspekty S Primerami I Zadachami V Srede Mathcad / *BHV-Peterburg.* – 2008. – 528 s.
13. **Rattan, S. S.** Strength of Materials / *Tata McGraw-Hill Education.* – 2008. – 585 s.

Поступила (received) 01.06.2015