

На правах рукописи



Лисицына Валентина Эдуардовна

**КОМПЬЮТЕРНОЕ ИЕРАРХИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
КИНЕТИКИ ЗАМЕДЛЕННОГО РАЗРУШЕНИЯ
ВЫСОКОПРОЧНЫХ СТАЛЕЙ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВОДОРОДА**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Тула 2016

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Тульский государственный университет».

Научный руководитель: доктор технических наук, **Баранов Виктор Павлович**

Официальные оппоненты: **Гадалов Владимир Николаевич**, доктор технических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет», г. Курск, профессор

Привалов Александр Николаевич, доктор технических наук, профессор, ФГБОУ ВПО «Тульский государственный педагогический университет им. Л.Н. Толстого», г. Тула, профессор

Ведущая организация: Научно-производственное предприятие "ВУЛКАН ТМ", г. Тула

Защита состоится 5 октября 2016 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 212.271.05 при ФГБОУ ВО Тульский государственный университет по адресу: 300012, г. Тула, пр. Ленина, 92, 12-105.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет» по адресу: 300012, г. Тула, пр. Ленина, 92 и на сайте <http://tsu.tula.ru/science/dissertation/diss-212-271-05/lisicina-ve/>

Автореферат разослан «3» августа 2016 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Соколова
Марина Юрьевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В современном материаловедении одним из основных стратегических направлений исследования поведения нагруженных твердых тел является многоуровневый подход, согласно которому твердые материалы, находящиеся под нагрузкой, превышающей предел упругости, рассматриваются как многоуровневая иерархически организованная система дефектов структуры, эволюция которой направлена на минимизацию внешнего воздействия на всех масштабных уровнях. К настоящему времени можно считать установленным, что пластическая деформация и разрушение твердых тел является коллективным многоуровневым иерархическим процессом. Поэтому основными объектами изучения становятся коллективные явления, сопровождающие процессы эволюции внутренней структуры нагруженных материалов, ее самоорганизацию, образование различных кластеров и субструктур. Однако, несмотря на значительное число публикаций, в которых процессы деструкции материалов изучаются в рамках иерархических представлений, построение многоуровневой модели деформируемого твердого тела находится на начальной стадии своего развития. В полной мере это относится к одному из опаснейших видов повреждений оборудования в химической, газонефтедобывающей, металлургической, машиностроительной, судостроительной и других отраслях промышленности, которым является водородное охрупчивание нагруженных высокопрочных сталей. Последствия такого охрупчивания могут быть катастрофическими, приводящими при длительной эксплуатации конструкций к замедленному разрушению (ЗР).

Многоуровневый подход к описанию процессов деформации и разрушения нагруженных материалов получил развитие в работах С.В. Панина, П.О. Маращук, В.П. Трусова, А.И. Швейкина, П.В. Макарова, В.Е. Михайлова, Р.Р. Балахонова, В.А. Романовой, С. Гроха, Я. Фаджоуи и других авторов. Подавляющее большинство используемых в настоящее время многоуровневых моделей относится к двухуровневым (мезо-, и макроуровни), которые используют различные подходы к описанию развития уже существующих в материале нарушений сплошности (микропор, микротрещин). В тоже время количество публикаций, посвященных трехуровневым моделям (с добавлением микроуровня), в которых анализируются процессы зарождения микронесплошностей, незначительно. Поэтому построение иерархической модели кинетики разрушения нагруженных поликристаллических материалов, учитывающей такие характерные черты процесса разрушения, как стадийность, многомасштабность, стохастичность и фрактальность, является актуальной научной проблемой, имеющей практическую ценность.

Исходя из вышеизложенного, **цель работы** состояла в разработке трехуровневой модели кинетики замедленного разрушения высокопрочных сталей под действием водорода.

Для достижения поставленной цели решались следующие **основные задачи**:

1. Установление определяющих соотношений для моделирования процессов зарождения и накопления микроповреждений (пор и субмикротрещин) в нагруженных материалах под действием водорода.

2. Разработка динамических моделей перколяции дефектов на микро- и мезоуровнях и выявление эволюции дефектной кластерной структуры на основе фрактального и статистического анализов.

3. Установление феноменологической зависимости длительной прочности от физико-механических параметров, характеризующих испытываемый материал и условия нагружения.

4. Разработка иерархической модели кинетики замедленного разрушения материалов под действием водорода.

5. Разработка программного комплекса с применением имитационного моделирования и построение номограмм для практического использования результатов исследования.

Методы исследования:

1. Теоретические методы, основанные на дискретно-континуальной и гетерогенной теориях образования зародышей разрушения, дислокационно-декогезионной теории влияния водорода на разрушение деформированных металлов, теории перколяции, синергетике и фрактальном анализе.

2. Численные и статистические методы.

3. Компьютерное и имитационное моделирование кинетики замедленного разрушения высокопрочных сталей под действием водорода.

Основные результаты работы, представляющие **научную новизну**:

1. Получены аналитические зависимости для определения работы локального разрушения (генерации микроповреждений) в нагруженных материалах для неактивных и водородсодержащих сред.

2. Разработаны динамические модели перколяции нераспространяющихся субмикротрещин на микроуровне и распространяющихся микротрещин на мезоуровне с применением фрактального и статистического анализов.

3. Разработаны трехуровневая (микро-, мезо-, макро) модель и на её основе комплекс программ для моделирования кинетики замедленного разрушения высокопрочных сталей под действием водорода и определения длительности стадий и времени до разрушения.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Аналитические зависимости для определения работы локального разрушения (образования пор и субмикротрещин) в нагруженных материалах для неактивных и водородсодержащих сред.

2. Реономная зависимость общей плотности микроповреждений, образующихся в процессе нагружения материала, основанная на термодинамическом подходе и экспериментальных кривых релаксации напряжений.

3. Динамические модели перколяции дефектов на микро- и мезоуровнях с применением фрактального и статистического анализов.

4. Феноменологическая зависимость длительной прочности нагруженных материалов под действием водорода от физико-механических параметров, характеризующих испытываемый материал и условия нагружения.

5. Трехуровневая (микро-, мезо-, макро) модель кинетики замедленного разрушения высокопрочных сталей под действием водорода.

6. Комплекс программ для моделирования эволюции дефектной кластерной структуры на каждом масштабном уровне и определения длительности стадий и времени до разрушения.

Практическая значимость работы заключается в том, что представленные в ней результаты составляют основу для прогнозирования повреждаемости (процессов зарождения и эволюции несплошностей различного масштабного уровня) и долговечности деталей и конструкций из высокопрочных сталей в условиях водородного охрупчивания.

По результатам работы подана заявка на патент РФ (№ 2016111782) «Образец для испытания на адгезионную прочность».

Результаты диссертационной работы внедрены в учебный процесс студентов ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет» по направлению подготовки магистратуры 01.04.02 «Прикладная математика и информатика» при проведении лекционных, практических и лабораторных занятий по дисциплине «Дискретные и вероятностные математические модели».

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госзадание № 1.1333.2014/К).

Достоверность результатов, полученных в работе, подтверждается согласованностью результатов теоретических исследований и компьютерного моделирования с экспериментальными данными, сопоставлением с результатами исследований других авторов, признанием полученных результатов на различных международных и отечественных конференциях.

Апробация работы. Основные положения и результаты исследования доложены и обсуждены на российских и международных научных конференциях: Международная научная конференция «Современные проблемы математики, механики, информатики» (Тула, 2012, 2013), всероссийская научно-техническая конференция «Инновационное развитие образования, науки и технологий» (Тула, 2012), Региональная молодежная научно-практическая конференция ТулГУ «Молодежные инновации» (Тула, 2013, 2014), Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико - химия и технология неорганических материалов» (Москва, 2013, 2014, 2015), научно-техническая конференция «Инновационные наукоемкие информационные технологии» (Тула, 2013, 2014), Всероссийская молодежная научная конференция с международным участием «Инновации в материаловедении» (Москва, 2013, 2015), Научные чтения им. чл.-корр. РАН И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов» (Москва, 2014), Региональная магистерская научная конференция (Тула, 2013, 2014), Международная научно-техническая конференция «Усталость и термоусталость материалов и элементов конструкций» (Киев, 2013), VI Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (Москва, 2015).

Публикации. Основные результаты, изложенные в работе, отражены в 20 научных публикациях, включая 3 статьи в рецензируемых научных журналах и 6 статей в сборниках трудов и материалах международных конференций.

Личный вклад. Все представленные в диссертации результаты исследований получены лично автором. Из совместных публикаций в диссертацию включены только результаты соискателя.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех разделов, заключения и общих выводов, библиографического списка из 127 наименований и 2-х приложений. Общий объем работы составляет 146 страниц машинописного текста, включая 36 иллюстраций и 9 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, перечислены основные результаты, представляющие научную новизну и практическую значимость работы, и положения, выносимые на защиту.

В **первом разделе** приведен аналитический обзор основных подходов к иерархическому моделированию процессов деформации и разрушения нагруженных материалов.

Согласно многоуровневому подходу, основными объектами изучения в современном материаловедении становятся коллективные явления при пластической деформации и разрушении нагруженных твердых тел, к которым относятся процессы эволюции структуры дефектов, ее самоорганизация, образование различных кластеров и субструктур. Приводится классификация и анализ иерархических моделей разрушения поликристаллических материалов. При пластической деформации происходит необратимая потеря сдвиговой устойчивости внутренней структуры и функциональные состояния каждой из подсистем необратимо, но самосогласованно изменяются, причем эти изменения развиваются стадийно. Смена каждой стадии классифицируется как точка бифуркации. Конечной целью построения многоуровневой модели деформируемого твердого тела является математическое описание самосогласованного на всех масштабных уровнях развития процесса деструкции.

На основе проведенного обзора делается вывод, что на современном этапе большинство моделей, описывающих кинетику разрушения нагруженных материалов, не учитывают стадийность процесса разрушения и иерархию масштабных уровней, а построение иерархической модели, которая находится на начальной стадии своего развития, требует комплексного подхода, основанного на принципах неравновесной и кинетической термодинамики, синергетике, теории фракталов и теории перколяции.

Во **втором разделе** установлены стадийность и иерархия масштабных уровней кинетики замедленного разрушения сталей под действием водорода на основе физической интерпретации кривых релаксации напряжений, типичный вид которых представлен на рис. 1. На временной шкале выделены характерные точки t_1 , t_2 и t_3 , в которых происходит резкое изменение скорости релаксации напряжений, связанное со сменой механизма разрушения.

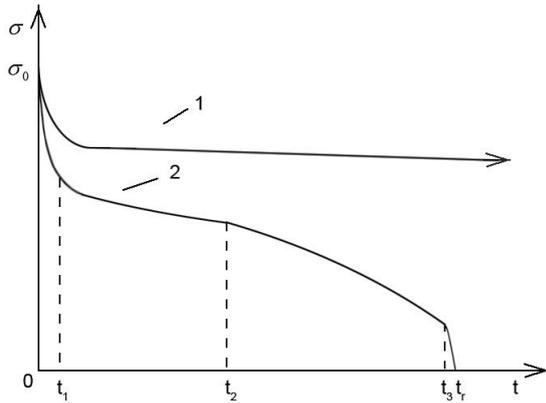


Рис. 1. Типичные кривые релаксации напряжений при испытании высокопрочных сталей на замедленное разрушение в инактивной среде (1) и под действием водорода (2)

статистической конкуренции образуется магистральная трещина, нестабильного роста которой (интервал $[t_3, t_r]$) приводит к разрушению.

Выполнен сравнительный анализ теорий замедленного разрушения металлов под действием водорода, на основе которого в качестве теоретической базы выбрана дислокационно-декогезионная концепция, согласно которой микроразрушение (потеря устойчивости равновесия в дислокационных очагах предразрушения) есть результат локализованного в ядрах сверх(дислокаций) декогезионного действия водорода, которое рассматривается как эффективное механическое проявление факторов разной физической природы (электронной, кластерной или гидридной).

Третий раздел посвящен моделированию кинетики поврежденности в нагруженных материалах под действием водорода на микро-, мезо- и макроуровнях.

На основе сравнительного анализа моделей мезоскопических зерен поликристаллических агрегатов в качестве модели зерна в данной работе была принята композитная модель Муграби-Валиева с границей, непроницаемой для дислокаций. В качестве внутренних границ раздела рассматривались границы зерен, которые представляют барьеры для распространения пластических сдвигов в нагруженном твердом теле.

На основе дискретно-континуальной модели заторможенного плоского скопления краевых дислокаций, эмитированных с границы зерна, и дислокационно-декогезионной концепции влияния водорода на разрушение деформированных металлов установлена критериальная зависимость, разделяющая стадии микроразрушения в виде

$$\bar{\sigma}_{ng}^H = \bar{g}_{mH}^2 \left(1,41 - 0,33 \sqrt{\alpha_n / \bar{g}_{mH}} \right), \quad (1)$$

где $\bar{\sigma}_{ng}^H = \sigma_{ng}^H / E$; $\bar{g}_{mH} = g_{mH} / E$, $g_{mH} = g_m - k_d N_H$; σ_{ng}^H – граничное значение локального растягивающего напряжения; E – модуль упругости; k_d – коэффици-

На микроуровне процессам зарождения, накопления и перколяции нераспространяющихся субмикротрещин, приводящих к образованию микротрещин, на кривой релаксации напряжений соответствует интервал $[0, t_1)$. На мезоуровне (интервал $[t_1, t_2)$) ведущим механизмом процесса разрушения является скачкообразное подрастание микротрещин и их перколяция, что приводит к генерации макротрещин. На макроуровне (интервал $[t_2, t_3)$) в результате стабильного (субкритического) роста сепарабельных макротрещин и их

ент эффективного декогезионного действия водорода в трещинообразующей (сверх)дислокации; N_H – линейная концентрация водорода в ядрах дислокаций; α_n – параметр неоднородности силового поля ядра лидирующей дислокации скопления ($0,75 \leq \alpha_n \leq 1$); $g_m \approx 0,18E$ – максимум отнесенной к единице площади силы взаимодействия атомных плоскостей по обе стороны от плоскости раскалывания дислокации.

Если локальное растягивающее напряжение σ_n , нормальное к плоскости скола, не превышает порогового σ_{ng}^H , то происходит зарождение разрушения в виде сверхдислокации мощности $2b$ (b – вектор Бюргерса) (первая стадия). В противном случае образуется субмикротрещина за счет поглощения всех дислокаций скопления (вторая стадия).

Анализ микроразрушения для высокопрочных конструкционных сталей на примере среднелегированной стали 30ХГСА (механические свойства: $E = 2,1 \cdot 10^5$ МПа, $G = 7,87 \cdot 10^4$ МПа, $\sigma_e = 1450$ МПа, $\sigma_{0,2} = 1270$ МПа, $\delta_{5d} = 7$ %, $\psi = 19$ %) показал, что в инактивной среде $\sigma_{ng} \approx 4200$ МПа, что реально недостижимо при статическом нагружении ниже предела текучести. В этом случае происходит зарождение микропор и последующий вязкий характер развития повреждаемости, не приводящий к разрушению материала. В водородсодержащей среде при характерных значениях параметров $k_d = 0,6 \cdot 10^{24}$ м·Па/моль и $N_H = 1$ атом/а (a – параметр решетки) $\sigma_{ng}^H \approx 840$ МПа. Такие напряжения реально достигаются в высокопрочных конструкционных сталях при уровне нагружения $\sigma > 0,5\sigma_{0,2}$, которые обеспечивают на микроуровне квазихрупкий характер разрушения, приводящий к образованию микротрещин.

Установлены аналитические зависимости для определения работы локального разрушения, требуемой для генерации микроповреждений:

$$A_p = Db^2L_0 \left[\ln(\zeta_L) - (1/8)(1 - \zeta_L^{-2}) \right], \quad (2)$$

$$A_s = A_p + 2Db^2L^* \left[\ln(\tilde{\zeta}_L) - (9/64)(1 - \tilde{\zeta}_L^{-2}) \right]. \quad (3)$$

Здесь A_p , A_s – работы образования сверхдислокации (поры) и субмикротрещины; $D = G / [2\pi(1 - \nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона; L_0 – расстояние между ведущими дислокациями скопления; $\zeta_L = L_0 / L_c$, $L_c = (\sqrt{3}/2)h_c$ – местоположение второй дислокации в момент достижения неустойчивости, приводящей к ее слиянию с ведущей дислокацией; $h_c = 4bD / (\alpha_n g_{mH} - \sigma_n)$ – максимальный размер ядра лидирующих дислокаций; $L^* = l_1 - L_0$, $l_1 = bD / \tau^*$ – начало хвостовой (континуальной) части скопления, τ^* – эффективное напряжение сдвига; $\tilde{\zeta}_L = L^* / L_c^*$, $L_c^* = 0,92h_c^*$ – местоположение третьей дислокации в момент достижения неустойчивости, приводящей к ее слиянию с зародышем разрушения; $h_c^* = 4(DE / g_{mH}^2)b$ – предельный размер устойчивой дислокационной трещины.

Установлена трансцендентная зависимость общей плотности микроповреждений (пор и субмикротрещин) от времени деформирования на основе кинетической термодинамики, начального участка машинной кривой релаксации приложенного к образцу напряжения и предположения, что этот участок соответствует процессу накопления повреждений на микроуровне:

$$\rho_d(t) = \frac{\Delta\sigma^2(t) / (\gamma_p E)}{(1 - \alpha_s) A_p + \alpha_s A_s - kT \ln[n_a / \rho_d(t) - 1]} \quad (4)$$

Здесь $\Delta\sigma(t) = \sigma_0 - \sigma(t)$ – релаксация напряжения в момент t ; σ_0 , $\sigma(t)$ – начальное и текущее напряжения; γ_p – коэффициент податливости нагружающей системы; α_p , α_s – объемные доли пор и субмикротрещин; kT – характерная тепловая энергия атомов, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура; n_a – число атомов в области генерации повреждений.

В условиях наводороживания при $\alpha_s = 1$ из формулы (4) следует уравнение эволюции плотности субмикротрещин:

$$\rho_s(t) = \frac{\Delta\sigma^2(t)}{\gamma_p E A_s} \{1 - \omega \ln[n_a / \rho_s(t) - 1]\}^{-1}, \quad (5)$$

где $\omega = kT / A_s$ – параметр водородной повреждаемости.

Построена динамическая модель перколяции нераспространяющихся субмикротрещин, включающая следующие основные элементы.

1. Управляющее уравнение модели (5). Установлена связь этого уравнения с моделью самоорганизации на основе системы Лоренца. На рис. 2 представлены численное решение трансцендентного уравнения (5) и его аппроксимация зависимостью дебаевского вида, которая является решением уравнения эволюции типа Ландау-Халатникова, полученного в пренебрежении временем установления постоянного растягивающего напряжения:

$$\rho_s(t) = \rho_{s0} \left\{ 1 - \exp \left[-(\bar{\sigma}_0 - 1) \left(t / \tau_{\rho_s} \right) \right] \right\}, \quad (6)$$

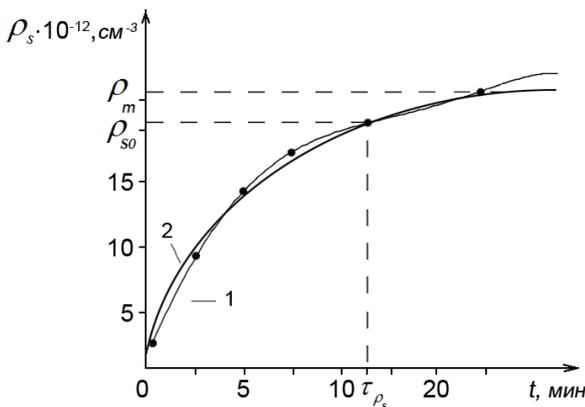


Рис. 2. Численное решение трансцендентного уравнения (5) (кривая 1) и его аппроксимация зависимостью (6) (кривая 2) для стали 30ХГСА

где $\rho_{s0} = \rho_{sm} \sqrt{\bar{\sigma}_0 - 1}$, $\bar{\sigma}_{0c} = \sigma_0 / \sigma_c$.

Здесь ρ_{s0} – точка минимума синергетического потенциала

$$F = \frac{\rho_{sm}^2}{2} \left[\bar{\rho}_s^2 - \bar{\sigma}_0 \ln(1 + \bar{\rho}_s^2) \right],$$

$\bar{\rho}_s = \rho_s / \rho_{sm}$, ρ_{sm} , τ_{ρ_s} – максимальное значение и характерное время релаксации плотности ρ_s ; $\bar{\sigma}_{0c}$ – параметр внешнего воздействия (степень неравновесности материала), σ_c – пороговое напряжение.

2. Закон распределения дефектов в области их генерации. В качестве модельной принималась объемная область между соседними зернами в виде параллелепипеда с характерными размерами $[l_{gr} \times h_{gr} \times H_{gr}]$ (l_{gr} , h_{gr} , H_{gr} – соответственно длина, ширина и высота межзеренного пространства), в которой методом Монте-Карло реализовалось в динамическом режиме равномерное распределение субмикротрещин с учетом их преимущественной ориентации. Количество высеваемых в единицу времени дефектов определялось по управляющему уравнению модели (5).

3. Динамическая проверка перколяции субмикротрещин и кластеров. Если расстояние между дефектами меньше критического, равного шагу перколяции, то происходит их слияние, после чего осуществляются формирование новой кластерной структуры и проверка образования соединяющего кластера.

4. Выделение остова соединяющего кластера (микротрещины). Построение остова (скелета) перколяционного кластера проводилось на основе модифицированного алгоритма Дейкстры, который позволяет найти кратчайшее соединение дефектов, пересекающее границы модельной области.

5. Статистический и фрактальный анализ дефектной перколяционной структуры в процессе ее эволюции. Построены зависимости количества кластеров от их массы и времени деформирования. Вычислялись фрактальная размерность соединяющего перколяционного кластера и показатель Херста, характеризующего персистентность стохастического процесса разрушения на микроуровне. Результаты анализа, полученные с помощью разработанного комплекса программ, приведены в четвертом разделе.

Предложен количественный критерий микро-мезо перехода в процессе деструкции материала – критическое изменение плотности внутренней энергии микроструктуры, значение которого соответствует работе, требуемой для образования микротрещин:

$$\Delta U_m^{cr} = \rho_d^{cr} \sum_{i=1}^n \alpha_i A_{d_i} \quad (7)$$

Здесь ρ_d^{cr} – общая критическая плотность дефектов, соответствующая порогу перколяции; α_i , A_{d_i} – объемная доля и работа образования i -го типа дефектов.

Построена динамическая модель перколяции распространяющихся микротрещин, включающее следующие основные этапы:

1. Построение области усреднения с учетом композитной модели зерна.

2. Подсчет плотности микротрещин и их равномерное распределение по границам зерен, реализуемое методом Монте-Карло.

3. Моделирование роста микротрещин по границам зерен по механизму дрейфа водородного максимума и динамическая проверка на возможность перколяции микротрещин и кластеров в зависимости от вида взаимодействия. Построение новой кластерной структуры и проверка на появление соединяющего кластера.

4. Выделение остова соединяющего кластера (макротрещины), статистический и фрактальный анализ дефектной перколяционной структуры, на основе

которого построены зависимости количества кластеров от их массы и времени деформирования.

Моделирование кинетики субкритического роста невзаимодействующих макротрещин под действием водорода проводилось по механизму дрейфа водородного максимума и поглощения сепаратных субмикротрещин. В результате статистической конкуренции при достижении длины одной из трещин критического размера ($l_{cr} \approx \gamma_{ef} E / \sigma_0$, где γ_{ef} – эффективная удельная поверхностная энергия) образуется магистральная трещина и происходит переход процесса разрушения к глобальной неустойчивости (стадии долома).

Установлена безразмерная зависимость для длительной прочности сталей под действием водорода, которая определялась как сумма длительностей стадий процесса разрушения на микро-, мезо- и макроуровнях:

$$\bar{t}_r = \frac{4,87\lambda^2(1-\lambda)^2}{n_p(\lambda + \bar{\varepsilon}_{Hk}^m - 1)^2} + \frac{0,4}{\bar{\varepsilon}_{\psi k} k_\sigma^2} \left\{ \begin{array}{l} 1 - \bar{K}_{IH^*}^4 + 2\bar{\psi}_{H0}^m(3\bar{\psi}_{H0}^m - 2) \ln \frac{\bar{\psi}_{H0}^m}{\bar{K}_{IH^*}^2 + \bar{\psi}_{H0}^m - 1} - \\ - 2\bar{\psi}_{H0}^m(1 - \bar{K}_{IH^*}^2) \left(2 - \frac{1 - \bar{\psi}_{H0}^m}{\bar{K}_{IH^*}^2 + \bar{\psi}_{H0}^m - 1} \right), \end{array} \right. \quad (8)$$

где $\bar{t}_r = t_r / t'$; $t' = (e^{2m} / \bar{\sigma}_{0,2}) (\delta_{Hc}^2 / D_H')$; $m \approx 0,9\sigma_{0,2}V_H / RT$; $\bar{\sigma}_{0,2} = \sigma_{0,2} / E$; $\lambda = \delta_{mic} / \delta_{Hc}$; $\bar{\varepsilon}_{Hk}^m = A_\varepsilon C_H^m / \varepsilon_{k0}$; $k_\sigma = \sigma_0 / \sigma_{0,2}$; $\bar{\varepsilon}_{\psi k} = \varepsilon_{k0} / \psi_0$; $\bar{\psi}_{H0}^m = A_\psi C_H^m / \psi_0$; $\bar{K}_{IH^*} = K_{IH^*} / K_{1Hc}$.

Здесь V_H – парциальный молярный объем водорода в металле; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура; δ_{Hc} – критическое раскрытие трещины под действием водорода; D_H' – эффективный коэффициент диффузии водорода в металле; δ_{mic} – раскрытие микротрещины; ε_{k0} – деформация разрушения в инактивной среде; A_ε – феноменологическая константа модели роста микротрещины, определяемая опытным путем по экспериментальным данным о пластичности наводороженных гладких образцов и учитывающая пропорциональное уменьшение деформации разрушения с ростом концентрации водорода в металле; $C_H^m = C_H e^{2m}$ – максимальная концентрация водорода в зоне предразрушения; $n_p(k_\sigma)$ – среднее число перколяций микротрещин до образования макротрещины; ψ_0 – относительное сужение образца в инактивной среде; A_ψ – феноменологическая константа модели роста макротрещины, определяемая опытным путем по экспериментальным данным о пластичности наводороженных гладких образцов и учитывающая пропорциональное уменьшение относительного сужения с ростом концентрации водорода в металле; K_{IH^*} – пороговое значение коэффициента интенсивности напряжений (КИН), соответствующее минимальному размеру макротрещины; K_{1Hc} – критический КИН при воздействии водорода.

Четвертый раздел посвящен разработке программного комплекса для моделирования кинетики замедленного разрушения металлов под действием водорода, который включает два компонента (рис. 3).

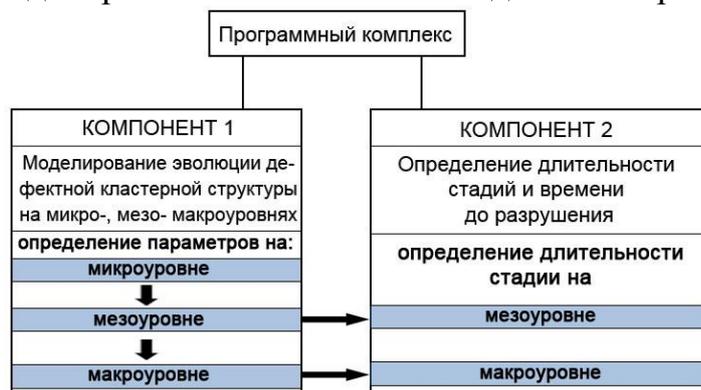


Рис. 3. Структура программного комплекса

На рис. 4 представлены результаты компьютерного моделирования процесса перколяции субмикротрещин в проекции на плоскость для стали 30ХГСА, для которого значение порога перколяции составило $0,96 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$.

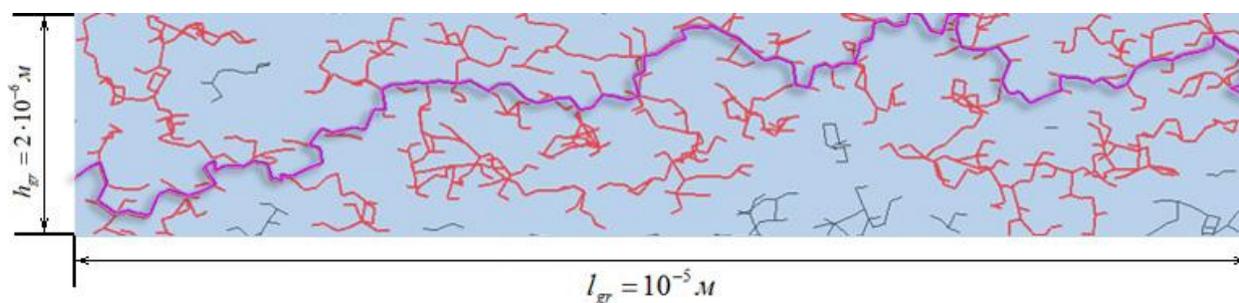


Рис. 4. Остов соединяющего перколяционного кластера (траектория роста микротрещины)

На основе статистического анализа дефектной кластерной структуры на микро- и мезоуровнях построены зависимости количества кластеров от их массы и времени деформирования.

Выявлена мультифрактальная природа дефектной кластерной структуры нагруженного материала. Отношение осредненных значений фрактальных размерностей и показателей Херста на микро-, мезо- и макроуровнях составили соответственно 2,26:1,12:1,03 и 0,74:0,88:0,97, что свидетельствует о самоподобии процесса разрушения на каждом масштабном уровне, вырождении фрактальной размерности и повышении степени персистентности (предсказуемости) стохастического процесса разрушения при межмасштабном переходе.

Программная реализация второго компонента программного комплекса представляет специально созданную web-страницу для ввода исходных параметров и вывода таблицы с расчетными значениями длительности стадий и времени до разрушения в зависимости от уровня растягивающего напряжения, концентрации водорода и физико-механических характеристик нагруженного материала. Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных значений для стали 30ХГСА показал их достаточно хорошее соответствие (табл.).

Для практического использования результатов исследования построены трехпараметрические номограммы $t_{mes} = f(k_{\sigma}, \bar{\varepsilon}_{Hk}^m, t')$ и $t_{mac} = f(k_{\sigma}, \bar{\psi}_{H0}^m, t')$, правые части которых представляют инвариантные зависимости длительности стадии от уровня растягивающего напряжения и безразмерной концентрации

водорода, а левые части позволяют определить фактическое значение этой длительности по значению параметра t' , идентифицирующего конкретную сталь и имеющего размерность времени.

Таблица

Расчетные и экспериментальные значения длительностей стадий и времени до разрушения для стали 30ХГСА

Время, мин	$k_\sigma = 0,6$			$k_\sigma = 0,7$			$k_\sigma = 0,8$		
	$C_H, \text{млн}^{-1}$			$C_H, \text{млн}^{-1}$			$C_H, \text{млн}^{-1}$		
	50	100	150	50	100	150	50	100	150
$\frac{t_{mes}}{t_{mes}^3}$	$\frac{50,7}{55,3}$	$\frac{38,8}{36}$	$\frac{24,4}{22}$	$\frac{41,5}{46,1}$	$\frac{27,7}{33,2}$	$\frac{23,8}{20,1}$	$\frac{38,8}{44,3}$	$\frac{26,4}{27}$	$\frac{20,1}{18,3}$
$\frac{t_{mac}}{t_{mac}^3}$	$\frac{59,9}{69,2}$	$\frac{49,9}{66,5}$	$\frac{24,4}{30,5}$	$\frac{55,3}{55,3}$	$\frac{38,8}{44,3}$	$\frac{22,6}{24,4}$	$\frac{47,1}{49,9}$	$\frac{30}{24}$	$\frac{21,4}{18,3}$
$\frac{t_r}{t_r^3}$	$\frac{110,6}{124,5}$	$\frac{88,6}{102,5}$	$\frac{48,8}{52,5}$	$\frac{96,8}{101,4}$	$\frac{66,5}{77,6}$	$\frac{46,4}{44,5}$	$\frac{85,9}{94,2}$	$\frac{56,4}{51}$	$\frac{41,5}{36,6}$

В заключении сформулированы основные результаты работы.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1. Установлены аналитические зависимости для определения работы локального разрушения, требуемой для генерации микрповреждений (пор и субмикротрещин) в нагруженных сталях для инактивных и водородсодержащих сред.

2. Установлена реономная трансцендентная зависимость общей плотности микрповреждений, образующихся в процессе нагружения материала, и выявлена ее связь с моделью Лоренца, позволяющей описывать деструкцию сплошных сред с учетом процессов самоорганизации. Показано, что численное решение трансцендентного уравнения аппроксимируется зависимостью дебаевского вида.

3. Разработана на микроуровне динамическая модель перколяции нераспространяющихся субмикротрещин с учетом их ориентации, на основе которой выявлена эволюция кластерной структуры микрповреждений с применением фрактального и статистического анализов. Установлен порог перколяции и выделен остов соединяющего кластера, представляющего траекторию роста микротрещины.

4. Разработана на мезоуровне динамическая модель перколяции распространяющихся микротрещин под действием водорода. Выявлена эволюция дефектной кластерной структуры до момента образования макротрещины с применением фрактального и статистического анализов.

5. Определена фрактальная размерность для каждого масштабного уровня и установлено её скачкообразное изменение при межмасштабном переходе. Вычислены показатели Херста, характеризующие персистентность стохастического процесса разрушения.

6. Установлена феноменологическая зависимость длительной прочности нагруженного материала под действием водорода от внутренних и внешних параметров процесса разрушения.

7. Разработана трехуровневая (микро-, мезо-, макро) модель кинетики замедленного разрушения высокопрочных сталей под действием водорода с применением имитационного и перколяционного моделирования и численных методов: метода Монте-Карло, алгоритма Дейкстры, интерполирования многочленом Лагранжа, а так же статистических и фрактальных методов.

8. Разработан комплекс программ, включающий два компонента. Первый компонент моделирует эволюцию дефектной кластерной структуры на каждом масштабном уровне. Второй компонент определяет длительности стадий и время до разрушения в зависимости от уровня растягивающего напряжения, концентрации водорода и физико-механических характеристик нагруженного материала.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В РАБОТАХ:

1. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Кинетика накопления микроповреждений в нагруженных конструкционных сталях повышенной и высокой прочности / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов, Н.Н. Сергеев, М.В. Пузикова // Известия ТулГУ. Естественные науки. 2013. – Вып. 1. – С. 190–201.

2. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Двухуровневое моделирование накопления поврежденности в высокопрочных нагруженных материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов // Известия ТулГУ. Естественные науки. 2014. – Вып. 2.– С. 245–263.

3. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Трехуровневое моделирование замедленного разрушения металлов под действием водорода / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов // Известия ТулГУ. Естественные науки. 2015. – Вып. 3. – С. 227–242.

Статьи, тезисы докладов

4. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) К вопросу построения модели накопления и слияния микроповреждений в нагруженных материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов, Н.Н. Сергеев, М.В. Пузикова // Сб. материалов Международной научной конференции «Современные проблемы математики, механики, информатики». – Тула: ТулГУ, 2012. – С. 99–101.

5. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) О возможности применения вероятностных клеточных автоматов для моделирования кластерной структуры / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Тезисы докладов 3-й Всероссийской научно-технической конференции «Инновационное развитие образования, науки и технологий». Ч. II. – Тула: ТулГУ, 2012.– С. 147–149.

6. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Модель накопления микроповреждений в нагруженных металлических материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. докладов VII Региональной молодежной научно-практической конференции "Молодежные инновации". Ч. II. – Тула: ТулГУ, 2013. – С. 213–214.
7. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Компьютерное моделирование накопления микроповреждений в конструкционных сталях при растяжении / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. материалов X Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов». – М: ИМЕТ РАН, 2013. – С. 138–139.
8. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Модель перколяции микроповреждений в нагруженных материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. материалов Всероссийской молодежной научной конференции с международным участием "Инновации в материаловедении" – М: ИМЕТ РАН, 2013. – С. 314.
9. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Модель образования микротрещин в нагруженных металлических материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. докладов VIII Региональной магистерской научной конференции. Часть II. – Тула: ТулГУ, 2013. – С. 121–122.
10. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Обзор алгоритмов теории перколяции, применяемых для моделирования накопления микроповреждений в нагруженных металлических материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Тезисы докладов научно-технической конференции "Инновационные наукоемкие информационные технологии". – Тула: ТулГУ, 2013. – С. 9–10.
11. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Анализ многомасштабного разрушения нагруженных материалов с позиций теории перколяции / В.П. Баранов, В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. материалов Межд. науч. конф. «Современные проблемы математики, механики, информатики». – Тула: ТулГУ, 2013. – С. 176–177.
12. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Кинетика зарождения микротрещин в нагруженных конструкционных сталях повышенной и высокой прочности / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов, Н.Н. Сергеев, М.В. Пузикова // Тезисы докладов Международной научно-технической конференции «Усталость и термоусталость материалов и элементов конструкций». – Киев: Ин-т проблем прочности им. Г.С. Писаренко НАН Украины, 2013. – С. 10–12.
13. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Построение и анализ перколяционного кластера микроповреждений в нагруженных металлических материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. материалов X Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов». – М: ИМЕТ РАН, 2014. – С. 175–176.
14. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Применение алгоритма Хошена–Копельмана для моделирования накопления микроповреждений в нагруженных металлических материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов // Тезисы докладов IX Региональной магистерской научной конференции. Ч. II. – Тула: ТулГУ, 2014. – С. 131.

15. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Двухуровневая модель накопления поврежденности в нагруженных конструкционных материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов // Научные чтения им. чл.-корр. РАН И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов» // Сб. материалов. – М: ИМЕТ РАН, 2014. – С. 74–75.

16. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Исследование перколяционного кластера как фрактального образования / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов // Тезисы докладов научно-технической конференции «Инновационные наукоемкие информационные технологии». – Тула: ТулГУ, 2014. – С. 174–175.

17. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Построение перколяционного кластера микроповреждений в нагруженных материалах / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. докладов VIII Региональной молодежной научно-практической конференции «Молодежные инновации». Ч. II.– Тула: ТулГУ, 2014. – С. 218–219.

18. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Компьютерное моделирование накопления поврежденности на мезоуровне в нагруженных конструкционных сталях / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов // Сб. материалов Второй Всероссийской молодежной научно-технической конференции с международным участием "Инновации в материаловедении". – М: ИМЕТ РАН, 2015. – С. 401–402.

19. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Микро-мезо переход в процессе замедленного разрушения конструкционных материалов под действием водорода / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына), В.П. Баранов, Н.Н. Сергеев, А.Н. Чуканов // Сб. материалов VI Международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – М: ИМЕТ РАН, 2015 – С. 116–118.

20. Степанова, В.Э. (Лисицына, В.Э.) Моделирование поврежденности нагруженных конструкционных сталей на мезоуровне / В.Э. Степанова (В.Э. Лисицына) // Сб. материалов XII Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов». – М: ИМЕТ РАН, 2015. – С. 179–181.