

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт *физики высоких технологий*

Направление подготовки *Материаловедение и технологии материалов*

Кафедра *Материаловедение в машиностроении*

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Компьютерное моделирование ударного нагружения систем с концентраторами напряжений в виде надреза

УДК 620.178.7:004 94

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Б21	Беспалов Александр Сергеевич		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
с.н.с. ИФПМ СО РАН	Моисеенко Дмитрий Давидович	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры менеджмента	Грахова Елена Александровна			

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Назаренко Ольга Брониславовна	д.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Материаловедение в машиностроении	Панин Виктор Евгеньевич	д.ф.-м.н., акад. РАН		

Томск – 2016 г.

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
P1	Применять основные положения и методы гуманитарных наук при решении социально-общественных и профессиональных задач в области материаловедения и технологии материалов
P2	Использовать современное информационное пространство при решении профессиональных задач в области материаловедения и технологии материалов
P3	Разрабатывать, оформлять и использовать техническую документацию, включая нормативные документы по вопросам интеллектуальной собственности в области материаловедения и технологии материалов
P4	Проводить элементарный экономический анализ ресурсов, технологий и производств при решении профессиональных задач в области материаловедения и технологии материалов
P5	Эффективно работать в коллективе на основе принципов толерантности, использовать устную и письменную коммуникации на родном и иностранном языках в мультикультурной среде
P6	Эффективно выполнять трудовые функции по реализации высокотехнологичных производств материалов и изделий
P7	Проводить комплексную диагностику материалов, процессов и изделий с использованием технических средств измерений, испытательного и производственного оборудования
P8	Готовность к мотивированному саморазвитию, самоорганизации и обучению для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности в области материаловедения и технологии материалов
P9	Успешно использовать методы и приемы организации труда, обеспечивающие эффективное, экологически, социально и технически безопасное производство
P10	Использовать принципы производственного менеджмента и управления персоналом в производственной деятельности в области материаловедения и технологии материалов

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт *физики высоких технологий*

Направление подготовки Материаловедение и технологии материалов

Кафедра Материаловедение в машиностроении

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

_____ Панин В. Е.

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
4Б21	Беспалов Александр Сергеевич

Тема работы:

Компьютерное моделирование ударного нагружения систем с концентраторами напряжений в виде надреза

Утверждена приказом директора ИФВТ

Приказ № _____ от _____

Срок сдачи студентом выполненной работы:

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Модельные образцы с U-, I-, и V-образным надрезами. Каждый образец моделировался посредством клеточного автомата с ГЦК упаковкой элементов размером 1 мкм. Размеры образцов: 60 мкм X 40 мкм X 10 мкм. Начальная температура каждого элемента задавалась равной 300 К, начальные значения деформации и напряжения были нулевыми. Величина временного шага – 1 нс. Граничные условия: торцевая грань, противоположная грани с надрезом, подвергалась деформации сжатия со скоростью 400 с ⁻¹ . Обмен энергией через остальные грани отсутствовал.
---------------------------------	---

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Провести детальное исследование распределения напряжений вблизи вершин надрезов с учетом диссипации упругой энергии. Построить графики временных зависимостей напряжений, моментов сил, относительной доли диссипирующей энергии вращения и картины пространственного распределения этих величин по поверхности образца. В результате исследования показано, что локальные моменты сил, являющиеся стоками энергии, способны снижать уровень напряжений вблизи концентратора в виде надреза. Детальный анализ распределения моментов сил вблизи концентратора напряжений позволил вскрыть взаимосвязь ротационных мод деформации на различных масштабных уровнях. Релаксация напряжений осуществляется наиболее эффективно, когда модуляция различных компонент момента происходит на разных масштабных уровнях.
---	---

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
<i>Финансовый менеджмент...</i>	Грахова Елена Александровна, ассистент кафедры менеджмента
<i>Социальная ответственность</i>	Назаренко Ольга Брониславовна, профессор, д.т.н.

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

Реферат

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
с.н.с. ИФПМ СО РАН	Моисеенко Дмитрий Давидович	к. ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Б21	Беспалов Александр Сергеевич		

РЕФЕРАТ

Ключевые слова: компьютерное моделирование, физическая мезомеханика, ударное нагружение, концентраторы напряжений, ротационные моды деформации.

Объектом исследования являются системы с концентраторами напряжений в виде надрезов.

Цель работы – детальное исследование распределения напряжений вблизи вершин надрезов с учетом диссипации упругой энергии.

В процессе исследования проводились численные эксперименты ударного нагружения образцов с U-, I-, и V-образным надрезами. Построены графики временных зависимостей напряжений, моментов сил, относительной доли диссипирующей энергии вращения. Строились картины пространственного распределения этих величин по поверхности образца.

В результате исследования показано, что локальные моменты сил, являющие стоками энергии, способны снижать уровень напряжений вблизи концентратора в виде надреза. Детальный анализ распределения моментов сил вблизи концентратора напряжений позволил вскрыть взаимосвязь ротационных мод деформации на различных масштабных уровнях. Релаксация напряжений осуществляется наиболее эффективно, когда модуляция различных компонент момента происходит на разных масштабных уровнях.

Степень внедрения: результаты исследований являлись частью отчетов по Гос. заданию в рамках Программы фундаментальных исследований РАН, проекту Президиума РАН 11.2, гранту РФФИ 15-08-05818.

Область применения: прогнозирование скоростей зарождения микротрещин в деталях, подвергающихся высокоскоростным деформациям, в изделиях авиационной промышленности.

В будущем планируется исследование влияния трехмерной кристаллической структуры на распределение моментов сил и релаксацию напряжений вблизи надрезов.

ESSAY

Keywords: computer simulation, physical mesomechanics, shock loading, stress concentrators, rotational deformation modes.

The object of the research is systems with stress concentrators imitated by the notches.

Objective - thorough investigation of stress distribution near the notches taking into account energy dissipation.

In the course of research were carried out numerical experiments aimed to simulation of shock loading of specimens with U-, I-, and V-shaped notches. Time dependencies of stresses, moment forces as well as dissipated energy portion were drawn. Moreover, spatial distribution of aforementioned values were, drawn on the surface of the specimen.

As a result of research, has been demonstrated that the local maxima of force moments are sites of energy release, which make it possible to relax the stresses near the notch tip. The detailed analysis of the force moment distribution near the stress concentrator allowed revealing the relationship between the rotational deformation modes at different scales. In this way the stresses are relaxed by means of the modulation of the magnitude and the sign of the force moment.

Extent of introduction: the study was used as a part of reports for fundamental Research Program of Russian State Academies of Sciences, RFBR project No. 15-08-05818 as well as grant of the Presidium of RAS No. 11.2.

Application area: prediction of crack generation rate in aviation parts suffering deformations of high rates.

In the future, investigation of the effect of three-dimensional crystalline structure on the force moment distribution and the stress relaxation near the stress riser is in the scope for the future research.

Оглавление

Введение	8
1. Обзор литературы	10
1.1. Кристаллографическое строение металлических материалов и теоретическая прочность на сдвиг	10
1.1.1 Дефекты кристаллической решетки	12
1.1.2 Плотность дислокаций	14
1.1.3 Основные механизмы пластической деформации	15
1.2. Методы механики сплошных сред	18
1.2.1. Компоненты тензора деформации	18
1.2.2. Тензор напряжения	21
1.2.3. Уравнение движения сплошной среды и закон Гука	23
1.3. Методы клеточных автоматов	28
1.4. Физическая мезомеханика деформируемого твердого тела как многоуровневых систем	40
2. Объект и методы исследования	47
2.1. Объект исследования	47
2.2. Метод исследования	48
2.2.1. Основы многоуровневого подхода к компьютерному моделированию процессов зарождения и роста усталостных трещин на базе термодинамических принципов физической мезомеханики	48
2.2.2. Моделирование циклического нагружения в рамках метода возбудимых клеточных автоматов	54
3. Результаты проведенного исследования	56
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	66
5. Социальная ответственность	84
Заключение	96
Список использованных источников	97

Введение

В настоящее время широко известно, насколько важен учет ротационных мод деформации в процессе разрушения материала [1-5]. В работе [2] хорошо описан эксперимент по формированию цепочек ротаций за фронтом ударной волны, вскрыта роль ротационных мод деформации в процессе откола. Возможности компьютерного моделирования с учетом поворотных мод дискретными методами представлены в работах [4-6]. Работа [3] посвящена возможностям построения аналитической теории самосогласованных поворотных мод в виде «турбулентных течений» в твердом теле со структурой. В работе [7] продемонстрирована главенствующая роль поворотных мод деформации в процессах растворения алюминиевой фольги в условиях знакопеременного нагружения, а также проникания твердых частиц вглубь материала [7]. Предложенная в [1] теория ротационно-волновых потоков в планарных подсистемах, хорошо объясняющая упомянутые экспериментальные исследования, так и не нашла своего прямого экспериментального подтверждения. В работе [8] подробно рассмотрены проблемы идентификации ротационных мод деформации при анализе векторов смещений оптико-телевизионным методом.

Таким образом, экспериментальное наблюдение столь маломасштабных и быстротекущих процессов весьма трудоемко и не всегда оправдано в силу неоднозначности интерпретации результатов. В связи с этим, данный раздел работы посвящен компьютерному моделированию процессов переноса энергии и массы на мезомасштабном уровне в непосредственной близости от вершины надреза.

«В последние годы школой академика В. Е. Панина развивается новое научное направление в области физики прочности и пластичности — физическая мезомеханика деформируемого твердого тела, в основе которого лежит концепция о том, что деформируемое твердое тело есть многоуровневая система, в которой пластическое течение самосогласованно развивается как последовательная эволюция потери сдвиговой устойчивости на различных масштабных уровнях:

микро, мезо и макро. Эта концепция на основе изучения элементарных актов пластической деформации ставит задачу вскрыть механизмы зарождения пластических сдвигов и трещин, объяснить поведение дислокационных ансамблей и дать физическую интерпретацию феноменологических закономерностей механики сплошной среды» [9].

1. Обзор литературы

1.1 Кристаллографическое строение металлических материалов и теоретическая прочность на сдвиг

Для рассмотрения природы физических процессов, прежде всего нужно остановиться на процессах пластической деформации и основах кристаллического строения.

Твердое тело можно рассмотреть как объем, который состоит из положительно заряженных ионов, находящийся в среде, образованной электронами. Свободные электроны, которые находятся между ионами, сближают их, стараясь привести силы отталкивания, между одноименно заряженными ионами, в равновесие. Из-за строения решетки, металлическая связь меняется слабо, при высоких смещениях атомов. Следовательно, одни части решетки сильно смещаются относительно других, что характеризует повышенную степень пластичности металлов.

Кристаллическое строение металлического материала охарактеризовано расположением атомов в металлических элементах. Известно, что в каждое кристаллическое вещество имеет свои межатомные и межплоскостные расстояния. Металлы в этом случае стремятся к более плотно упакованной структуре. Металлические материалы имеют три основных кристаллических типа решеток: ОЦК – объемноцентрированная, ГЦК – гранецентрированная и ГПУ – гексагональная плотноупакованная.

Наиболее важное свойство металлических материалов высокая способность к пластической деформации. Пластическая деформация протекает при скольжении плоскостей, в определенных направлениях. Для каждой кристаллической решетки существуют разные системы скольжения. Система скольжения, есть совокупность направления и плоскости скольжения.

Металлы с гексагональной кристаллической решеткой имеют основную, наиболее плотно упакованную, плоскость, которую рассматривают как плоскость скольжения. Такие металлы обладают наиболее низкой способностью к пластической деформации, в отличие от металлов с другим типом решетки.

Для образования деформации в плоскости скольжения и направлении этого скольжения, нужно увеличить в данном направлении критическое напряжение сдвига.

Проанализируем монокристалл в виде цилиндра с площадью сечения S , на ось которого действует растягивающее напряжение σ (рисунок 1). Предположим, что скольжение идет по плоскости S' . Площадь сечения данной плоскостью составит величину $S' = S/\sin\alpha$, где α – угол образованный осью цилиндра и плоскостью скольжения.

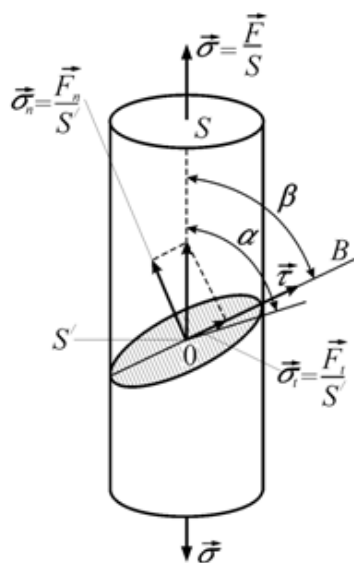


Рисунок 1 – Монокристалл в виде цилиндра с площадью сечения S

Представим силу в виде ее составляющих, таких как нормальная F_n и тангенциальная F_t и вычислим касательное напряжение: $\tau = F_t/S'$. Примем, что направление вектора τ будет совпадать с направлением вероятного скольжения OB . Тогда скалывающее напряжение к направлению скольжения OB будет

$$\tau = \sigma \sin\alpha \cos\beta \quad (1)$$

Из формулы (1) следует, что скалывающее напряжение τ максимально, при условии, что угол между плоскостью и направлением скольжения составит с осью цилиндра 45° .

Из всего вышеописанного следует, что нормальные напряжения оказывают незначительное влияние на пластическую деформацию. Она возникает под воздействием касательных напряжений.

Пластическая деформация образуется тогда, когда скалывающее напряжение τ выше критических значений, характерных для данного материала и системы скольжения.

1.1.1 Дефекты кристаллической решетки

Дефекты кристаллического строения решетки можно подразделить по геометрическим признакам на такие как точечные (нульмерные), линейные (одномерные), поверхностные (двумерные) и объемные (трехмерные).

Точечные дефекты малы во всех трех измерениях. К точечным дефектам относятся: а) вакансии – свободный, незанятый атомом, узел кристаллической решетки; б) дислоцированные атомы – атомы основного элемента, находящиеся в междоузлии элементарной ячейки; в) примесные атомы – атомы других элементов, которые находятся в узлах или междоузлиях кристаллической решетки. Точечные дефекты появляются при кристаллизации за счет воздействия механических, тепловых и электрических воздействий.

Возможно появление вакансий и дислоцированных атомов вследствие тепловых движений атомов. В металлических кристаллических решетках энергия возникновения дислоцированных атомов намного больше энергии возникновения тепловых вакансий. В следствии этого тепловые вакансии являются основными точечными дефектами в металлах. Точечные дефекты свободны в определенных объемах металла, также они постоянно перемещаются в кристаллической решетке за счет процесса диффузии.

Наличие вакансий является причиной возникновения диффузии, то есть перемещения атомов на расстояния, выше средних межатомных расстояний для данного металла.

Локальные изменения межатомных расстояний, а также искажения кристаллической решетки происходят за счет точечных дефектов.

В 2-х измерениях малы линейные дефекты, так как в третьем они наибольшего размера, и могут быть соизмеримы с длиной кристалла. К линейным дефектам можно отнести дисклинации, дислокации, а также группы вакансий и атомов в междоузлиях. К поверхностным дефектам можно отнести границы зерен, дефекты упаковки, границы субзерен и двойников, и они малы лишь в одном измерении. Также существуют объемные дефекты, которые во всех трех измерениях имеют значительно большие размеры. Видами объемных зерен являются трещины, поры, включения и тому подобные.

Большое влияние на такие свойства как пластичность и прочность металлов оказывают – дислокации.

Дислокации – линейный дефект или лишняя полуплоскость, которая нарушает кристаллическую решётку твёрдого тела.

Лишняя полуплоскость, нарушающая порядок в кристаллической решетке, называется экстраплоскостью, а нижний край экстраплоскости — дислокационной линией. Мера нарушения кристаллической решетки, обусловленная наличием в ней дислокаций, называется вектором Бюргерса b . Для оценки степени искаженности решетки, которую вызвала дислокация, строится контур Бюргерса. Контур Бюргерса это замкнутый, произвольной формы, контур, который построен в реальном кристалле через последовательный обход дефекта от атома к атому в правильной области кристалла.

Если рассматривать перемещение краевой дислокации, то оно похоже на движение ковра при перемещении складки. Если присутствует краевая дислокация, то сдвиг проходит в плоскости скольжения перпендикулярно линии дислокации.

При незначительном перемещении атомов около дислокации последняя под действием сдвигового напряжения передвигается через решетку. В результате выхода дислокации на обратную поверхность кристалла появляется единичная ступенька скольжения, а дислокация пропадает. В этом случае контур Бюргерса обходит участок металла с совершенной кристаллической решеткой.

Другой тип линейного дефекта, это винтовая дислокация, за счет нее сдвиг происходит параллельно линии дислокации. В результате, вытекает следующее определение дислокации: дислокация – линейный дефект, являющийся границей зоны сдвига в кристалле. Эта граница разделяет плоскости скольжения на части в которой сдвиг уже произошел, от той где сдвиг еще не начинался. При рассмотрении на макроскопическом масштабе такой сдвиг внутри кристалла будет виден как линия [10].

1.1.2 Плотность дислокаций

Плотность дислокаций оказывает большое влияние на формирование структуры и свойств кристаллических материалов. Имеется два способа оценки плотности дислокаций, то есть количества дислокаций, которые пересекают произвольно выбранные сечения кристаллов на площади один сантиметр квадратный, и суммарную длину дислокационных линий в один сантиметр кубический. В обоих способах число дислокаций на 1 см^2 есть размерность плотности дислокации. При выявлении дислокаций на поверхностях кристаллов обычно используют первый способ. Его применяют при сравнительно небольших плотностях дислокаций в кристаллах и если уверены, что ямки травления согласуются со всеми вышедшими на поверхность дислокациями. При данном способе не принимаются во внимание небольшие дислокационные петли, которые остались внутри объема кристалла.

Вторым способом определяют плотность дислокаций при применении электронно-микроскопии тонких пленок «на просвет». При этом также нужно

учитывать, выход из объема части дислокаций, который возможен при утонении больших кристаллов до тончайших пленок от 100 до 200 нм. Электронный микроскопический метод не используется при плотностях дислокаций, выше 10^{10}см^{-2} . В таких случаях, чаще всего используются рентгенографические методы. Влиять на плотность дислокаций, могут разные факторы, например такие как нитевидные кристаллы.

1.1.3 Основные механизмы пластической деформации

Деформация на макроскопическом уровне суммируется из перемещения множества дислокаций. Количественно величина сдвига γ выражается формулой:

$$\gamma = \rho Lb, \quad (2)$$

где ρ — плотность дислокаций; L — перемещение дислокаций и b — вектор Бюргерса.

С возрастанием степени пластической деформации плотность дислокаций увеличивается за счет того, что уменьшается длина их пробега, охарактеризованного взаимодействием дислокаций и наличием различных барьеров в виде включений, границ зерен, вторых фаз и тому подобное. С возрастанием уровня напряжений растет число источников дислокаций в металлическом материале и идет увеличение их плотности. Кроме параллельных дислокаций образуются дислокации в различных направлениях и плоскостях. При взаимодействии дислокаций друг на друга происходит взаимное уничтожение, так как они мешают друг другу перемещаться. С увеличением плотности дислокаций становится наиболее затрудненным их передвижение, поэтому требуется увеличение прикладываемого нагружения для продолжения деформации. Для упрочнения возможны и другие несовершенства кристаллического строения, которые тормозят движение дислокаций, такие как атомы примесей и легирующих элементов растворенных в металле, зеренные границы или границы блоков и т.д. [11]. На практике упрочнение, создается легированием, наклепом,

термомеханической или термической обработкой. Спад температуры тоже способствует препятствию свободного перемещения дислокаций. При малых температурах растет прочность, а пластичность уменьшается. Металл становится намного прочнее, но хрупче.

В результате вышесказанного, повышение прочности металлов и сплавов достигается двумя путями: 1) получением металлических материалов с близким к идеальному строению кристаллической решетки, то есть металлов, в которых нет дефектов кристаллического строения или их небольшое количество; либо, напротив, 2) повышением числа структурных изъянов, которые препятствуют движению дислокаций, но повышение плотности дислокаций не может быть бесконечным. При достижении пороговой плотности дислокаций 10^{13} — 10^{14} см⁻² в локальных областях металлических материалов зарождаются субмикроскопические трещины, которые ведут к разупрочнению [12,13].

В целом прочность твердых материалов зависит от деформации, ее скорости и температуры. Она определяется различными процессами на атомарном уровне, такими как скольжение отдельных дислокаций, скольжение групп дислокаций, переползание дислокаций, механическое двойникование и так далее. Все выше упомянутые процессы, которые протекают на атомарном уровне, оказывают определяющее влияние на пластическое течение. Пластичность поликристаллического тела, на основе выше указанных процессов на атомарном уровне, можно разделить на пять групп [14]:

1. Разрушение за счет напряжения, которое соответствует идеальной прочности. Пластичность развивается при превышенных теоретических напряжениях сдвига. Такое разрушение может наблюдаться у бездефектных кристаллов.

2. Пластическая деформация при низких температурах за счет скольжения дислокаций, которая контролируется решеточным сопротивлением, отдельными препятствиями или другим типом торможения дислокаций.

3. Пластическая деформация при низких температурах за счет двойникования. Двойникование есть разновидность дислокационного скольжения, при котором происходит движение частичных дислокаций.

4. Пластическая деформация при высоких температурах типа ползучести, проходящая в соответствии со степенным законом за счет дислокационного скольжения или скольжения и переползания. Эта деформация контролируется за счет процессов скольжения дислокаций, которые зависят от объемной диффузии, и другими процессами.

5. Пластическое течение которое контролируется объемной диффузией или зернограницной диффузией.

«Перечисленные механизмы могут действовать в сочетании, образуя сложные комбинации; в результате может реализовываться ряд других механизмов. Ротационные механизмы деформации рассмотрены в монографии» [15].

Рассмотрев физические основы процессов пластической деформации металлических материалов, можно проанализировать структурные изменения, протекающие в условиях циклического деформирования. При циклическом деформировании металлов в зависимости от кристаллических решеток, структурных состояний основного металлического материала и его поверхностных слоев, температур испытания и многих других факторов возможно наблюдение всех рассмотренных выше механизмов пластической деформации.

1.2 Методы механики сплошных сред

1.2.1 Компоненты тензора деформации

Термин деформация есть изменение формы выделенного объема среды от некоторой τ_0 (недеформированной) до некоторой последующей (деформируемой) τ .

Рассмотрим деформацию в декартовой системе координат. Начальный момент времени t_0 - до деформации. Выделим некоторый объем τ_0 . В момент времени $t > t_0$ данный объем изменит свою форму в следствии деформации. В объеме τ_0 выделим две близкие материальные точки M и N , $M(a_1, a_2, a_3)$, $N(a_1 + da_1, a_2 + da_2, a_3 + da_3)$. В момент времени t эти точки перейдут в точки $M'(x_1, x_2, x_3)$ и $N(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3)$. Квадрат расстояния между точками M и N до деформации равен: $dS_0^2 = (da_1)^2 + (da_2)^2 + (da_3)^2$. После деформации квадрат расстояния между точками будет равен: $dS^2 = (dx_1)^2 + (dx_2)^2 + (dx_3)^2$. Разностью

$$dS_0^2 - dS^2 \quad (3)$$

является мера деформации в окрестности выбранной точки M .

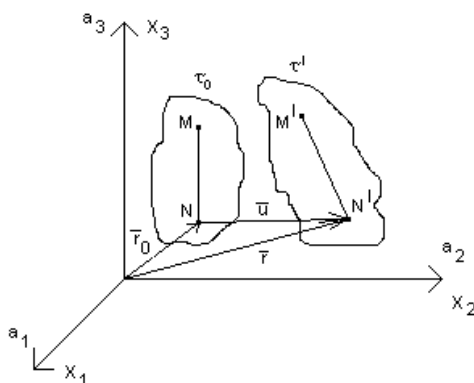


Рисунок 2 – Схема деформации отдельных участков сплошной среды в твердом теле

Добавим в рассмотренное выше перемещение точки $N: \bar{u}$. Видно, что $\bar{u} = \bar{r} - \bar{r}_0$ и есть функция искомых координат точки $\bar{u} = \bar{u}(a_1, a_2, a_3)$, где a_1, a_2, a_3 - координаты Лагранжа. Определим разность $dS^2 - dS_0^2$ через вектор перемещения. Очевидно, что $x_i = a_i + u_i(a_1, a_2, a_3)$.

Тогда

$$dx_i = da_i + \frac{\partial u_i}{\partial a_k} da_k = da_i + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial a_k} da_k \quad (4)$$

Через равенство (4) найдем dx_i^2 :

$$dx_i^2 = da_i^2 + 2da_i \frac{\partial u_i}{\partial a_k} da_k + \left(\frac{\partial u_i}{\partial a_k} da_k \right)^2 = da_i^2 + 2 \frac{\partial u_i}{\partial a_k} da_i da_k + \frac{\partial u_i}{\partial a_k} \frac{\partial u_i}{\partial a_j} da_k da_j. \quad (5)$$

Преобразуем 2-е слагаемое в (5):

$$2 \frac{\partial u_i}{\partial a_k} da_i da_k = \left(\frac{\partial u_i}{\partial a_k} + \frac{\partial u_k}{\partial a_i} \right) da_i da_k.$$

В пятом слагаемом расположим наоборот индексы i и j . Тогда получим:

$$dx_i^2 = da_i^2 + \left(\frac{\partial u_i}{\partial a_k} + \frac{\partial u_k}{\partial a_i} \right) da_i da_k + \frac{\partial u_j}{\partial a_k} \frac{\partial u_j}{\partial a_i} da_k da_i$$

Следовательно, разность $dS^2 - dS_0^2$ будет выглядеть следующим образом:

$$dS^2 - dS_0^2 = \left(\frac{\partial u_i}{\partial a_k} + \frac{\partial u_k}{\partial a_i} + \frac{\partial u_j}{\partial a_k} \frac{\partial u_j}{\partial a_i} \right) da_i da_k = 2\varepsilon_{ik} da_i da_k,$$

где

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial a_k} + \frac{\partial u_k}{\partial a_i} + \frac{\partial u_j}{\partial a_k} \frac{\partial u_j}{\partial a_i} \right). \quad (6)$$

Величины ε_{ik} – компоненты тензора деформации.

Из формулы (6) величины ε_{ik} составляют симметричный тензор 2-ого ранга, который называют Лагранжевым тензором конечных деформаций.

Аналогично можно получить выражение для компонент тензора деформаций в переменных Эйлера. С этой целью воспользуемся снова понятием меры деформации (3):

$$dS^2 - dS_0^2 = dx_i^2 - da_i^2.$$

Запишем компоненты вектора перемещений $\bar{u}$ как функции текущих координат:

$$u_i = u_i(x_1, x_2, x_3),$$

$$a_i = x_i - u_i(x_1, x_2, x_3),$$

$$da_i = dx_i - \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k.$$

Проводя выкладки, аналогичные приводимым выше найдем, что:

$$dS^2 - dS_0^2 = dx_i^2 - da_i^2 = \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] dx_i dx_k = 2\varepsilon_{ik}^* dx_i dx_k,$$

где

$$\varepsilon_{ik}^* = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right]. \quad (7)$$

Формула (7) – формула для компонент тензора в переменных Эйлера.

Если рассматривать малые деформации и считать, что малы не только деформации u_i , но и их производные $\frac{\partial u_j}{\partial a_k}, \frac{\partial u_j}{\partial a_i}$, то формулы (6) и (7) упрощаются и

принимают вид:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial a_k} + \frac{\partial u_k}{\partial a_i} \right), \quad (8)$$

$$\varepsilon_{ik}^* = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right]. \quad (9)$$

1.2.2 Тензор напряжения

Пусть $\Delta \vec{F}$ - главный вектор сил, действующих на элементарную массу Δm .

Тогда массовой силой в точке M называют силу $\vec{F} = \lim_{\substack{\Delta m \rightarrow 0 \\ M \in \Delta m}} \frac{\Delta \vec{F}}{\Delta m}$. Массовая сила $\vec{F}$

имеет размерность ускорения.

Пусть $\Delta \vec{\sigma}$ - главный вектор сил, действующий на площадку S . Принцип Коши утверждает, что отношение $\frac{\Delta \vec{\sigma}}{S}$ при $S \rightarrow 0$ стремится к некоторой конечной

величине. Отношение $\vec{\sigma} = \lim_{S \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{\sigma}}{S}$ называют напряжением в точке M . В системе

СИ размерность напряжения 1 Па , где $1 \text{ Па} = 1 \frac{\text{Н}}{\text{м}^2}$.

Определим компоненты тензора напряжений в декартовой системе координат. Рассмотрим некоторую точку M сплошной среды, через которую проходит плоскость с нормалью $\vec{n}$. Переместим плоскость в направлении нормали на некоторое расстояние h и проведем через точку M три плоскости, параллельные координатным плоскостям. Тогда данные плоскости, пересекаясь, вырежут в исследуемой среде объем в виде тетраэдра $ABCM$.

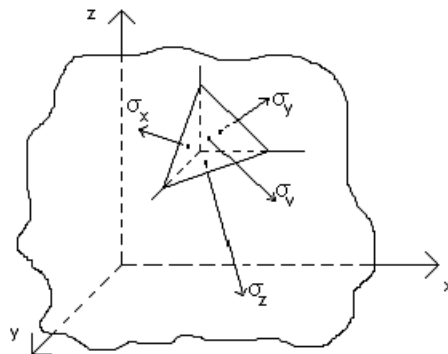


Рисунок 3 – Принципиальная схема к определению тензора напряжений в сплошной среде

Тогда, обозначения действующих по его граням напряжений, представляющих взаимодействие этого тетраэдера с остальным телом, должны иметь начертания $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \sigma_v$, где σ_v - напряжение, действующее на данную точку, σ_x - проекция напряжения σ_v на ось OX , σ_y - проекция напряжения на ось OY , σ_z - проекция напряжения σ_v на ось OZ . Составляющие напряжений, параллельные координатным осям и действующие по трем взаимно перпендикулярным площадкам, параллельные координатным плоскостям, должны получить такие обозначения:

от σ_x - составляющие $\sigma_{xx}, \sigma_{yx}, \sigma_{zx}$;

от σ_y - составляющие $\sigma_{xy}, \sigma_{yy}, \sigma_{zy}$;

от σ_z - составляющие $\sigma_{xz}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz}$.

Заметим, что составляющие $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$, как нормальные к соответствующим площадкам, представляют нормальные напряжения, остальные же касательные напряжения.

Таким образом, напряжение в точка M выражается через 9 величин σ_{ij} , которые называются компонентами тензора напряжений. Составим из этих величин матрицу:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}.$$

Написанную выше симметричную квадратную матрицу называют тензором напряжений.

1.2.3 Уравнение движения сплошной среды и закон Гука

Деформируемая сплошная среда является совокупностью материальных точек (частиц), поэтому уравнение движения сплошной среды можно получить из общих законов для системы материальных точек.

Рассмотрим некоторый элементарный объем сплошной среды. Пусть на этот объем действует массовая сила $\bar{F}$. Разложим массовую силу на компоненты $F = F_x + F_y + F_z$, каждый из которых можно представить в виде $F_i = F_1 + F_2 + F_3, i = \overline{1,3}$.

Зная, что напряжение $\sigma = \frac{F}{S}$, тогда для F_x :

$$F_1 = \sigma \cdot S = \sigma_{xx} dx dy, F_2 = \sigma \cdot S = \sigma_{xy} dz dx, F_3 = \sigma \cdot S = \sigma_{xz} dz dy,$$

где $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^1 - \sigma_{xx}^2, \sigma_{xy} = \sigma_{xy}^1 - \sigma_{xy}^2, \sigma_{xz} = \sigma_{xz}^1 - \sigma_{xz}^2$.

Аналогичные выражения получаем для F_y и F_z .

Из второго закона Ньютона известно: $F = ma = \rho Va$.

Отсюда:

$$F_x = ma_x = \rho Va_x = \rho a_x dx dy dz, F_y = ma_y = \rho Va_y = \rho a_y dx dy dz, F_z = ma_z = \rho Va_z = \rho a_z dx dy dz.$$

Таким образом, уравнение движения сплошной среды имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z}, \\ \rho \frac{\partial u_y}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z}, \\ \rho \frac{\partial u_z}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z}. \end{cases}$$

Под действием деформации в теле возникает сила, стремящаяся восстановить прежние размеры и форму тела.

Возникает сила за счет электромагнитного взаимодействия между молекулами вещества и атомами. Эта сила называется силой упругости.

При небольших деформациях сила упругости пропорциональна деформации тела, она направлена в сторону, обратную направлению движения частиц тела при деформации:

$$F_x = F_{уп} = -kx.$$

Данное соотношение основывает установленный закон Гука. Коэффициентом k называют жесткость тела, которая измеряется в ньютонах на метр ($\frac{H}{м}$). Данный коэффициент зависит от формы, материала и размеров тела.

Закон Гука при деформации растяжения или сжатия, с точки зрения физики, принято записывать по-другому. Зная, что напряжение имеет соотношение $\sigma = \frac{F}{S}$, где S – площадь поперечного сечения деформированного тела, закон Гука можно описать следующим образом, относительная деформация (ε) пропорциональна напряжению (σ):

$$\varepsilon = \frac{1}{E} \sigma.$$

В данной формуле E коэффициент, который называют модулем Юнга. Модуль Юнга не зависит от размеров и формы тела, но зависит от свойств материала. Модуль Юнга меняется для различных материалов. Например, для стали $E \approx 2 \cdot 10^{11} \text{ Н/м}^2$, а для резины на 5 порядков меньше $E \approx 2 \cdot 10^6 \text{ Н/м}^2$.

Известно, что сплошная среда при деформации изменяет свое напряженное состояние. При описании связи напряжений и деформаций в упругой среде определяющую роль имеют законы теории упругости. При формулировке свойств упругой среды возникают дополнительные сложности, так как необходимо учитывать зависимость напряжений от теплового состояния, которое может

характеризоваться температурой. Это приводит к необходимости использования базовых понятий термодинамики. Рассмотрим простейшую упругую среду – идеальный газ. В идеальном газе тензор напряжений является диагональным и пропорционален единичному в любой ортогональной системе координат:

$$\| \Rightarrow \left(\begin{array}{ccc} \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} P & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & P \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccc} \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \\ \circ & \circ & \circ \end{array} \right) \| \quad (10)$$

где $P = P(\rho, T)$ – давление.

В общем, если напряжённое состояние элемента среды не зависит от пути деформации, определяется только матрицей C и энтропией S , то среда называется упругой. Поэтому возьмем в качестве параметров состояния среды элементы c_{ij} , матрицы C :

$$E = E(c_{11}, c_{12}, \dots, c_{33}, S). \quad (11)$$

Из-за того что среда изотропна, число аргументов в данном уравнении может сократиться. Установлено, что каждая матрица C , у которой определитель положительный можно представить в виде

$$C = UKV, UU^* = I, VV^* = I, \quad (12)$$

$$K = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \\ 0 & 0 & k_3 \end{pmatrix}, \det U = \det V = 1. \quad (13)$$

Это выражение сводится к растяжению через некоторые три координатные оси и повороту. Следовательно, сделаем вывод, что в изотропной среде, где все направления равноправны, потери энергии определяются лишь коэффициентами растяжения k_1, k_2, k_3 , не смотря на направления осей, через которые проводится это растяжение. Следовательно, если $C = UKV$ матрица, переводящая стандартное состояние среды в состояние, где тензор напряжений соглашается с тензором напряжений наблюдаемого элемента Δm упругой среды, то напряжённое

состояние будет соответствовать плотности внутренней энергии E , которая определяется только посредством k_1, k_2, k_3, S :

$$E = E(k_1, k_2, k_3, S). \quad (14)$$

Равенство координатных осей показывает, что E является симметрической функцией k_1, k_2, k_3 , то есть не изменяется при перестановке данных аргументов.

Принцип энтропии и второе начало термодинамики позволяют сформулировать следующее утверждение. Если элемент среды массы Δm в некотором напряжённом состоянии нагревается без деформации, т.е. без изменения параметров k_1, k_2, k_3 , то количество затраченного тепла зависит от изменения энтропии и энергии следующим образом:

$$\delta Q = \frac{\partial E}{\partial S} \delta S. \quad (15)$$

Отсюда следует, что производная $\frac{\partial E(k_1, k_2, k_3, S)}{\partial S}$ в упругой среде соответствует температуре:

$$\frac{\partial E(k_1, k_2, k_3, S)}{\partial S} = T. \quad (16)$$

Известно, что, зная производные $\partial E / \partial k_1$, $\partial E / \partial k_2$, $\partial E / \partial k_3$, можно рассчитать напряжения в продеформированной среде, на подобии того, что в случае с идеальным газом с помощью производной $\partial E(\rho, S) / \partial \rho$ можно определить давление $p = \rho^2 \partial E(\rho, S) / \partial \rho$. Эта совокупность взаимосвязей между напряжениями и производными выглядит следующим образом:

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial E}{\partial k_{ij}}. \quad (17)$$

Известно, что в случае изотропной упругой среды все недиагональные компоненты тензора напряжений при рассматриваемой деформации равны нулю:

$$\sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0. \quad (18)$$

В результате, если в изотропной среде со внутренней энергией $E = E(k_1, k_2, k_3, S)$, напряжённое состояние выходит из ненапряжённого стандартного состояния с энтропией S_0 с помощью растяжения вдоль координатных осей с коэффициентами k_1, k_2, k_3 и такого изменения температуры, что в конечном состоянии энтропия оказывается равной S , то напряжения в данной среде задаются посредством следующего тензора напряжений:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial E}{\partial k_1} & 0 & 0 & \frac{\partial E}{\partial S} \\ 0 & \frac{\partial E}{\partial k_2} & 0 & \frac{\partial E}{\partial S} \\ 0 & 0 & \frac{\partial E}{\partial k_3} & \frac{\partial E}{\partial S} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Рассмотрим формулы диагональных элементов тензора:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial k_1} &= \frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{\partial k_1}{\partial k_1} = \frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{\partial k_1}{\partial k_1} = \frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{\partial k_1}{\partial k_1}, \\ \frac{\partial E}{\partial k_2} &= \frac{\partial E}{\partial k_2} \frac{\partial k_2}{\partial k_2}, \\ \frac{\partial E}{\partial k_3} &= \frac{\partial E}{\partial k_3} \frac{\partial k_3}{\partial k_3}, \end{aligned} \quad (20)$$

Из данных соотношений получим термодинамическое тождество

$$\frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{\partial k_1}{\partial k_1} + \frac{\partial E}{\partial k_2} \frac{\partial k_2}{\partial k_2} + \frac{\partial E}{\partial k_3} \frac{\partial k_3}{\partial k_3} + \frac{\partial E}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial S} = \frac{\partial E}{\partial k_1} \frac{\partial k_1}{\partial k_1} + \frac{\partial E}{\partial k_2} \frac{\partial k_2}{\partial k_2} + \frac{\partial E}{\partial k_3} \frac{\partial k_3}{\partial k_3} + \frac{\partial E}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial S} \quad (21)$$

подобное тождеству $dE = \frac{1}{\rho} p dT$ для идеального газа. Данные выражения для напряжений в упругой среде называются формулами Мурнагана.

1.3 Методы клеточных автоматов

Описание деформации неравновесных поверхностных слоёв должно проводиться в рамках неравновесной термодинамики. Согласно [16, 17], неравновесные твёрдые тела следует классифицировать как сильно возбуждённые состояния, в которых возникают коллективные атом-вакансионные конфигурационные возбуждения. Последние вызывают развитие в неравновесной структуре коллективных масштабно-инвариантных структурных превращений, приближающих систему к термодинамическому равновесию. Это приводит к снижению внутренней энергии неравновесной системы и производству энтропии. Без подобного термодинамического анализа описать корректно деформацию сильно неравновесных систем не представляется возможным. Впервые указанный подход был развит В.Е. Егорушкиным в рамках полевой теории неупругой деформации твёрдого тела [18]. В настоящее время подобный термодинамический подход развивается в работах О.Б. Наймарка при описании ударно-волновой деформации твёрдых тел [19], в работах Б.Е. Победри по механике композитов [20].

Для решения задачи по моделированию распределения напряжений и деформаций на интерфейсе «неравновесный поверхностный слой – основной объём материала» в рамках термодинамической постановки были использованы методы клеточных автоматов, которые широко используются более 50 лет и хорошо зарекомендовали себя в таких областях науки, как физика, химия, биология, гидродинамика, и т.д. Данные подходы основаны на представлении моделируемой среды в виде ансамбля взаимодействующих активных элементов определённого размера. Метод клеточных автоматов позволяет производить расчёт быстро протекающих динамических процессов, таких как распределение энергии в деформируемом твёрдом теле, не решая сложных дифференциальных уравнений, использование которых зачастую является весьма затруднительным.

Благодаря столь быстрому развитию компьютерной техники, метод клеточных автоматов существенно расширяет область своих применений и

успешно используется для решения широкого спектра задач – от газодинамики до проблем роста костной ткани, взаимодействия клеток организма, кинетики распространения волн горения и образования дендритных структур при кристаллизации [21]. Методы дискретного моделирования применительно к проблемам физики прочности развиты в работах Овчинского и др. [22-24] и были названы подходами структурно-имитационного моделирования [24]. Применительно к задачам механики прочности и разрушения твердого тела, структурно-имитационное моделирование позволяет имитировать такие процессы, как накопление микрповреждений, рост локальных очагов пластической деформации, формирование дефектных ансамблей и дальнейший переход к полному разрушению материала.

Клеточными автоматами принято называть сети из элементов, меняющих свое состояние в дискретные моменты времени по определенному набору правил в зависимости от того, каким было состояние самого элемента и его ближайших соседей по сети в предыдущий дискретный момент времени. В рамках данного подхода каждый элемент среды наделен совокупностью состояний.

Численное моделирование, при использовании метода клеточных автоматов, осуществляется, как правило, согласно описанному ниже алгоритму:

1. Задание внешних размеров образца и определение граничных условий;
2. Формирование геометрии внутренней структуры образца;
3. Задание распределения локальных свойств материала для каждого автомата по всему объему (например – разброс прочности, упругих модулей, скорости деградации материала, плотность дислокаций и т.п.);
4. Задание связей между автоматами;
5. Задание множества возможных состояний автоматов и формулировка правил их переключения;
6. Численная реализация перераспределения и динамики распространения возмущений между автоматами в результате внешних воздействий.

Характерной чертой применения данного подхода к решению задач разрушения твердого тела относится введение понятия элементарных актов процесса разрушения [24-26]. При использовании данной модели становится возможным описание процесса накопления повреждений (и дальнейшей деградации материала) с учетом перераспределения напряжений.

Что означает задать сеть из элементов? Пусть мы имеем некоторый набор из N элементов, пронумерованных последовательно числами $1, 2, \dots, N$. Нам нужно указать связи между элементами. Для этого необходимо для каждого j -го элемента задать ту группу элементов, которые являются его ближайшими соседями. Будем обозначать множество ближайших соседей j -го элемента как $O(j)$: если $j' \in O(j)$, то элемент с номером j' является ближайшим соседом элемента j .

Состояние отдельно взятого j -го элемента в момент времени n характеризуется некоторой переменной $a_j^{(n)}$. Эта переменная может быть целым числом, действительным или комплексным, либо представлять собой набор из нескольких чисел (т.е. быть "векторной" переменной).

Теперь необходимо определить правила перехода между состояниями. Здесь мы ограничимся рассмотрением однородных клеточных автоматов, для которых все элементы сети – так же, как и связи между ними – одинаковы. Тогда правила перехода должны быть одними и теми же для любого из элементов. Идентичность элементов означает также, что все ближайшие соседи данного элемента находятся в равном положении и в равной мере влияют на то, каким будет его следующее состояние. Например, закон перехода может иметь вид

$$a_j^{(n+1)} = F(a_j^{(n)}, \sum_{j' \in O(j)} a_{j'}^{(n)}) \quad (22)$$

В этом случае состояние данного элемента в момент времени $n+1$ является однозначной функцией F от двух переменных – состояния этого элемента и суммы состояний его ближайших соседей в предшествующий момент времени n .

При таком определении клеточный автомат не обладает памятью. Клеточные автоматы с памятью можно получить, предположив, что функция F зависит, например, также от состояния элемента $a_j^{(n-1)}$ в еще более ранний момент времени.

Кроме того, поскольку переходы между состояниями однозначно определены, клеточный автомат, отвечающий правилу перехода, является детерминированным. Тем не менее, можно указать такие ситуации, когда переходы имеют случайный характер. Тогда вместо функции F возможно задать следующий набор вероятностей переходов:

$$w_{ij}^{(n)} = \frac{1}{Z} \exp \left(- \sum_{k \in \mathcal{N}(j)} J_{jk} a_k^{(n)} \right) \quad (23)$$

Данный набор вероятностей показывает, какой будет вероятность перехода j -го элемента из состояния $a_j^{(n)}$ в n -й момент времени в состояние $a_j^{(n+1)}$ в последующий $n+1$ -й момент времени при условии, что состояния его ближайших элементов в n -й момент принимали определённые значения. Подобные клеточные автоматы называют вероятностными.

Приведённые выше общие определения не предполагают регулярность сети. В частности, случайно варьироваться может число связей отдельного элемента, т.е. число его ближайших соседей. Ограничимся использованием только лишь регулярных сетей, элементы которых занимают узлы правильной решетки. В качестве этой решетки наиболее часто используется простая квадратная или гексагональная плоская решётка, кубическая пространственная решётка, и т.п. Хотелось бы подчеркнуть, что тип решётки не связан прямо с размерностью пространства, в которое она погружена.

Например, на плоскости вполне можно разметить сеть с топологией кубической решетки. Чтобы себе это представить, возьмём кубическую решетку, где связи между узлами сделаны из гибких изолированных "проводников". Сбросим теперь эту трёхмерную сетку на подстилающую плоскость. Очевидно, что тогда

мы получим сеть на плоскости, по топологии своих связей полностью эквивалентную правильной кубической решётке.

Кроме задания типа решётки, следует указать, какие узлы из окрестности данного элемента мы будем считать его ближайшими соседями.

Так, для простой квадратной решётки соседями данного элемента можно считать либо только элементы, расположенные вверх – вниз и влево – направо от него (рисунок 4, а), либо добавить к ним ещё и диагональные элементы (рисунок 4, б).



Рисунок 4 – Два возможных способа выбрать соседей элемента в случае квадратной решётки.

Рассмотрим сначала общие свойства детерминированных клеточных автоматов с конечным числом состояний.

Если отдельный элемент сети может находиться лишь в одном из состояний, все эти состояния можно перенумеровать так, что переменная $a_j^{(n)}$ будет принимать ряд целых значений от 0 до $K-1$. Предположим, что сеть является правильной и каждый элемент имеет ровно r соседей. Каково общее число возможных правил перехода (22) для такой сети?

Согласно (22), выбор будущего состояния элемента определяется комбинацией из двух целых чисел: состояния $a_j^{(n)}$ самого этого элемента и суммы состояний $a_{j'}^{(n)}$ его ближайших соседей r в данный дискретный момент времени n . Первое из них принимает K , а второе rK различных значений. Поэтому число различных комбинаций равно rK^2 . Каждой такой комбинации необходимо

сопоставить одно из K возможных значений величины $a_j^{(n+1)}$. Следовательно, полное число различных клеточных автоматов с заданными K и r составляет

$$N_{полн} = K^{rK^2}. \quad (24)$$

Оно неожиданно велико. Например, для квадратной решетки с четырьмя ближайшими соседями ($r = 4$), в узлах которой расположены элементы, способные находиться лишь в одном из двух состояний ($K = 2$), мы получаем $N_{полн} = 256$. Если же к ближайшим соседям отнести также четыре диагональных элемента, то $r = 8$ и $N_{полн} = 2^{32} = 65536$.

Динамика рассматриваемых детерминированных клеточных автоматов с конечным числом состояний является необратимой. Действительно, при задании алгоритма переходов каждой из rK^2 возможных комбинаций двух чисел $a_j^{(n)}$ и $\sum a_j^{(n)}$ мы должны сопоставить одно из K возможных значений величины $a_j^{(n+1)}$. Поскольку число исходных комбинаций rK^2 гораздо больше числа конечных состояний K , различным исходным комбинациям соответствуют одни и те же конечные состояния. Но это означает, что по конечному состоянию всей сети невозможно однозначно восстановить ее исходное состояние.

Лишь сравнительно недавно в работах С. Уолфрама было предпринято систематическое моделирование на компьютере простейших клеточных автоматов с малым числом состояний. Как показал С. Уолфрам, по своему поведению эти автоматы делятся на четыре класса.

Клеточные автоматы класса I , называемые также бистабильными, достигают за конечное число шагов однородного состояния, в котором величины $a_j^{(n)}$ для всех элементов сети одинаковы и не зависят от времени. Это однородное состояние устанавливается независимо от того, каким было исходное состояние (картина активности) сети. В процессе эволюции для таких клеточных автоматов полностью теряется информация о начальных условиях.

Приведём простой пример клеточного автомата класса I. Пусть элементы занимают узлы одномерной цепочки и каждый элемент имеет два ближайших соседа – слева и справа от него. Пусть также каждый элемент может находиться в двух состояниях: $a_j = 0$ (покой) и $a_j = 1$ (активность). Рассмотрим следующее правило перехода:

$$a_j^{(n+1)} = \begin{cases} 1, & \text{если } a_j^{(n)} = a_{j-1}^{(n)} = a_{j+1}^{(n)} = 1, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (25)$$

Нетрудно убедиться, что, согласно этому правилу, все элементы сети приходят со временем к состоянию покоя. Действительно, после каждого следующего шага исчезают все активные одиночные элементы, а в группах, состоящих из двух и более активных элементов, в состояние покоя переходят два крайних элемента.

Клеточные автоматы класса II, или возбудимые клеточные автоматы, генерируют локализованные простые структуры. Эти простые структуры могут быть стационарными или периодическими по времени.

Рассмотрим два примера клеточных автоматов этого класса, представляющих собой одномерную цепочку из элементов с двумя возможными состояниями – покоя и активности.

Первый пример. Пусть элемент цепочки сохраняет состояние активности, если в предшествующий момент времени среди его соседей слева и справа было не больше одного активного элемента, и переходит из состояния покоя в состояние активности, если в этот момент времени были активными оба его соседа:

$$a_j^{(n+1)} = \begin{cases} 1, & \text{если } a_j^{(n)} = 1, \quad a_{j-1}^{(n)} + a_{j+1}^{(n)} = 0, \\ 1, & \text{если } a_j^{(n)} = 1, \quad a_{j-1}^{(n)} + a_{j+1}^{(n)} = 1, \\ 1, & \text{если } a_j^{(n)} = 0, \quad a_{j-1}^{(n)} + a_{j+1}^{(n)} = 2, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (26)$$

Такой клеточный автомат генерирует простые периодические по времени структуры.

Второй пример. Пусть каждый элемент имеет по два соседа слева и справа в цепочке, а переходы между состояниями осуществляются по правилу

$$a_j^{(n+1)} = \begin{cases} 1, & \text{если } q_j^{(n)} = 3, \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (27)$$

где

$$q_j^{(n)} = \sum_{l=-2}^2 a_{j+l}^{(n)} \quad (28)$$

Этот клеточный автомат генерирует стационарные локальные структуры – тройки из активных элементов.

Клеточные автоматы классов III и IV обладают более сложной динамикой. Вообще говоря, в пределе $N \rightarrow \infty$ различные картины активности сети для таких автоматов сменяют друг друга, никогда не повторяясь. Локализованное возмущение порождает процесс изменения активности, который захватывает с течением времени всё большую часть сети. Отличительной особенностью клеточных автоматов класса III, называемых также автоколебательными, является то, что по прошествии достаточно большого числа временных шагов статистические свойства разворачивающегося процесса теряют зависимость от начальных условий. Тем самым, автоматы класса III обладают "эргодическим", или "турбулентным", поведением.

Динамика клеточных автоматов класса IV существенно зависит от начальной картины активности сети. Подбирая определённые начальные условия, можно генерировать самые различные последовательности сменяющих друг друга картин. Клеточные автоматы класса IV могут, подобно "машине Тьюринга", осуществлять универсальные вычисления. Хотя имеется несколько кандидатов на роль клеточного автомата класса IV, в настоящее время твёрдо установлено только,

что таким автоматом является игра "Жизнь", предложенная в 1970 г. в качестве математического развлечения Джоном Конвеем.

Используя клеточные автоматы, можно решать различные задачи обработки информации.

Недостатками подобных методов является сложность перевода дискретных состояний в непрерывные величины физических параметров и наличие навязанной анизотропии передачи информации от одного автомата к другому (особенно в задачах газо- и гидродинамики). Данная проблема может быть решена путем развития концепции клеточных автоматов как целого и введением способности автоматов изменять свое пространственное положение. Это было сделано и развитый метод получил название метод подвижных клеточных автоматов (английская аббревиатура – MCA).

В рамках подхода подвижных клеточных автоматов моделируемый объект рассматривается как набор элементов. Эти элементы и называются подвижными клеточными автоматами. В данном методе элементы среды (автоматы) обладают способностью менять не только свои состояния (подобно классическим автоматам), но также и свои положения и ориентации. Таким образом в рассмотрение необходимо ввести следующие новые параметры автомата: $\vec{R}^i$ — радиус-вектор, $\vec{V}^i$ — трансляционная скорость, $\vec{\omega}^i$ — угловая скорость, $\vec{\theta}^i$ — угол разворота, m^i — масса, $\hat{J}^i$ — момент инерции.

Новая концепция метода MCA основана на введении в рассмотрение состояния пары автоматов (отношения взаимодействующих пар автоматов) дополнительно к обычному — состоянию отдельного автомата. Заметим, что совместное рассмотрение этих состояний позволяет перейти от концепции сеток к концепции соседей. В результате автоматы имеют возможность менять своих соседей путём переключения состояний (отношений) пар.

Подчеркнём, что метод МСА имеет все преимущества обычного подхода клеточных автоматов.

Введение нового типа состояний приводит к новому параметру для определения критерия переключений межавтоматных отношений — параметру межавтоматного перекрытия:

$$h^{ij} = r^{ij} - r_0^{ij}. \quad (29)$$

Здесь r^{ij} — расстояние между центрами соседних элементов, а r_0^{ij} определяется как $r_0^{ij} = (d^i + d^j)/2$, где d^j — размер автомата.

В соответствии с концепцией бистабильных автоматов, существует два типа состояний пар (отношений):

$$\text{связанные} \quad h^{ij} < h_{\max}^{ij} \quad (h_{11}^{ij} = 0) \quad (30)$$

$$\text{несвязанные} \quad h^{ij} > h_{\max}^{ij} \quad (h_{13}^{ij} \in (h_{\max}^{ij}, +\infty)). \quad (31)$$

В простейшем случае: связанные — это пары автоматов, между которыми имеется химическая связь, а несвязанные — пары, между которыми нет химической связи.

Таким образом, изменение состояния отношения пары определяется относительным движением автоматов и среда, образованная такими парами может рассматриваться как бистабильная. Начальная структура формируется путём задания определённых отношений каждой паре соседствующих элементов.

Следуя модели Винера-Розенблюта, распределённая бистабильная активная среда может быть описана уравнением:

$$\frac{\Delta h^{ij}}{\Delta t} = f(h^{ij}) + \sum_{k \neq j} C(ij, ik) I(h^{ik}) + \sum_{l \neq i} C(ij, jl) I(h^{jl}), \quad (32)$$

где $C(ij, ik(jl))$ — коэффициенты, связанные с переносом параметра перекрытия h от одной пары автоматов к другой; $I(h^{ik(jl)})$ — явная функция $h^{ik(jl)}$, которая определяет перераспределение $h^{ik(jl)}$ между парами ij , ik и jl . Функция состояния пары $f(h^{ij})$ имеет смысл относительной скорости автомата j (V_n^{ij}).

В линейном приближении функция $I(h^{ik(jl)})$ может быть записана как

$$I(h^{ik(jl)}) = \psi(\alpha_{ij,ik(jl)}) V_n^{i(k)j(l)}, \quad (33)$$

где $\psi(\alpha_{ij,ik(jl)})$ определяется взаимным расположением (ориентацией) пар автоматов ij , ik и jl , $\alpha_{ij,ik(jl)}$ — некоторый параметр взаимной ориентации.

Эволюция среды подвижных клеточных автоматов будет описываться следующими уравнениями движения для трансляционной составляющей:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 h^{ij}}{dt^2} = & \left(\frac{1}{m^i} + \frac{1}{m^j} \right) p^{ij} + \sum_{k \neq j} C(ij, ik) \psi(\alpha_{ij,ik}) \frac{1}{m^i} p^{ik} + \\ & + \sum_{l \neq i} C(ij, jl) \psi(\alpha_{ij,jl}) \frac{1}{m^j} p^{jl}. \end{aligned} \quad (34)$$

На мезомасштабном уровне, как и на макромасштабном, нужно также описывать вращение. По аналогии с уравнением (34) уравнения для вращательной, составляющие движения могут быть записаны как:

$$\frac{d^2 \theta^{ij}}{dt^2} = \left(\frac{q^{ij}}{J^i} + \frac{q^{ji}}{J^j} \right) \tau^{ij} + \sum_{k \neq j} S(ij, ik) \frac{q^{ik}}{J^i} \tau^{ik} + \sum_{l \neq i} S(ij, jl) \frac{q^{jl}}{J^j} \tau^{jl}, \quad (35)$$

Здесь θ^{ij} — угол относительного разворота (он также является параметром переключения, как и h^{ij} для трансляционной составляющей); $q^{ij(ji)}$ — расстояние от центра автомата $i(j)$ до точки контакта с автоматом $j(i)$ (плечо момента); τ^{ij} — тангенциальная сила парного взаимодействия; $S(ij, ik(jl))$ — некоторые коэффициенты, связанные с переносом параметра θ от одной пары к другой (они аналогичны коэффициентам $C(ij, ik(jl))$ в уравнениях для трансляционной составляющей движения). Следует заметить, что уравнения (34) и (35) полностью аналогичны уравнениям движения для многочастичного подхода.

В общем случае поведение каждого автомата при внешнем воздействии определяется межавтоматными взаимодействиями. В свою очередь взаимодействия между автоматами определяются определёнными функциями отклика автоматов. Таким образом в фазовом пространстве эволюция системы определяется уравнениями движения. Эти уравнения включают ограничивающие соотношения и силы.

Вследствие мобильности каждого автомата метод МСА непосредственно учитывает такие процессы, как:

1. Перемешивание масс
2. Эффекты проникания
3. Интенсивные деформации
4. Накопление повреждений
5. Генерацию и развитие трещин
6. Фрагментацию и разрушение материалов
7. Фазовые переходы
8. Химические превращения и так далее

Используя граничные условия различного типа (жёсткие, упругие, вязкоупругие и т.д.) возможно имитировать различные свойства окружающей среды, содержащей моделируемую систему. Возможно моделировать различные типы механического нагружения (растяжение, сжатие, сдвиговую деформацию и т.д.) задавая дополнительные условия на границах.

1.4 Физическая мезомеханика деформируемого твердого тела как многоуровневых систем

В последнее десятилетие интенсивно развивается физическая мезомеханика, которая рассматривает деформируемое твёрдое тело как многоуровневую систему [27-29]. В рамках многоуровневого подхода поверхностные слои и внутренние границы раздела классифицируются как самостоятельные подсистемы. Они играют важную функциональную роль в зарождении и развитии пластических сдвигов, связанных с потерей сдвиговой устойчивости нагруженного твёрдого тела на разных масштабных уровнях: нано-, микро-, мезо- и макроскопическом.

Наименьшую сдвиговую устойчивость в деформируемом твёрдом теле имеют его поверхностные слои. В них происходит более интенсивное, чем в основном объёме материала, накопление деформационных дефектов. Сопряжение поверхностного слоя с подложкой обуславливает возникновение на их интерфейсе неоднородного распределения нормальных и касательных напряжений [30]. Естественно ожидать, что подобная неоднородность должна играть существенную роль в зарождении пластических сдвигов в поверхностных слоях на различных масштабных уровнях. Однако теоретических исследований роли интерфейса «поверхностный слой – подложка» в зарождении сдвигов на различных масштабных уровнях пока нет.

Поведение деформируемого твердого тела традиционно описывается на основе двух подходов: механики сплошных сред и теории дислокаций. Подход механики сплошных сред физически и математически является вполне корректным, но только в случае определения интегральных свойств макрооднородной среды. В теории дислокаций описываются поведение деформируемого твердого тела на микромасштабном уровне. Задача состоит в том, чтобы на основе изучения элементарных актов пластической деформации объяснить механизмы генерации пластических сдвигов и трещин, поведение дислокационных ансамблей и

физически проинтерпретировать закономерности механики сплошных сред. Теория дислокаций оказалась весьма успешной при описании поведения различных дефектов в нагруженном твердом теле на микромасштабном уровне.

Изначально происходит потеря сдвиговой устойчивости в локальных зонах кристаллической решетки на микроуровне. На неоднородностях структуры возникают микроконцентраторы напряжений, вызывающие локальные перестроения кристаллической решетки, что проявляется в зарождении и движении дислокации. Так как влияние такого микроконцентратора является близкодействующим, перемещение дислокаций осуществляется на небольшие расстояния только в зоне микроконцентратора. Процесс деформации приводит к возрастанию плотности дислокаций, а также других дефектов. При достижении критического значения плотности происходит потеря сдвиговой устойчивости кристаллической решетки на мезомасштабном уровне. Это приводит к тому, что становятся возможными структурные перестроения на большие расстояния в любых кристаллографических направлениях. В результате зарождаются новые типы дефектов – мезодефекты (дисклинации, полосовые структуры, микродвойники, мартенситные ламели и т.д.). Они делают возможным перемещение в деформируемом твердом теле объемных элементов структуры различного масштаба: субзерен, зерен, их конгломератов, протяженных блоков материала. Движение структурных элементов различного масштаба на мезоуровне становится определяющим механизмом деформации.

В тот момент, когда мезодефекты проходят вдоль всего сечения образца, он теряет сдвиговую устойчивость на макроуровне, т.е. весь образец в целом становится сдвиgoneустойчивым. После этого формируется макроконцентратор напряжений, локализирующий макродеформацию и приводящий к самосогласованному развитию системы мезодефектов в определенном сечении образца. Данный процесс обуславливает возникновение в зоне локализации деформации несплошностей, фрагментацию материала и его разрушение.

Развитие масштабных уровней потерей сдвиговой устойчивости деформируемого твердого тела является синергетическим процессом. Синергетика рассматривает деформируемое твердое тело как открытую систему, являющуюся сильнонеравновесной в локальных зонах концентраторов напряжений, подверженную неравновесным локальным структурным превращениям в ходе нагружения. Развитие таких превращений идет на различных масштабных уровнях и характеризуется энергией, объемной протяженностью и скоростью их протекания. При заданных граничных условиях нагружения происходит самоорганизация локальных структурных превращений, что приводит к формированию диссипативных структур, развитие которых определяет характер пластической деформации и разрушения.

Было обнаружено, что все типы деформационных дефектов в кристаллах следует рассматривать не как нарушение целостности кристаллической решетки исходного материала, а как элементы других структур. Так, расщепленные дислокации, развивающиеся в ГЦК-кристаллах, являются элементами ГПУ-структуры, протяженные дефекты упаковки и двойники в ГЦК-кристаллах являются ГПУ-структурами на плотноупакованных плоскостях. При температурах, близких к температуре структурного превращения, деформация осуществляется по механизму образования мартенситных ламелей как другой фазы. Таким образом, зарождение пластического течения представляет собой локальный кинетический структурный переход и происходит в локальной зоне кристалла за счет производства энтропии.

Локальное структурное превращение, приводящее к зарождению дислокации, описывается как «сильновозбужденное состояние в кристалле». При сильном возбуждении в пространстве междоузлий кристалла возникают новые разрешенные структурные состояния. В результате сильновозбужденный кристалл становится комбинацией нескольких структур. Если в зоне концентратора напряжений возникло сильновозбужденное состояние, то под действием градиента

напряжений происходит направленное структурное превращение, интерпретируемое как зарождение дислокации. Распространение дислокации происходит только в зоне концентратора напряжений, характеризуемой кинетическим структурным превращением.

В рамках физической мезомеханики деформация нагруженного твердого тела рассматривается как самосогласование структурных уровней деформации. Несмотря на то, что пластическая деформация является неравновесным процессом, движение структурных элементов различного масштабного уровня под действием внешнего приложенного напряжения определяется законами механики.

На макромасштабном уровне общепринятым является математический аппарат механики сплошной среды. В основе пластического течения лежат сдвиги в поле средних приложенных напряжений при нагружении твердого тела выше предела упругости. Кривая «напряжение – деформация» описывается как деформационное упрочнение материала, связанное с полями его внутренних напряжений. Различные виды деформации (при квазистатическом или ударном нагружении, циклическом деформировании ниже предела текучести, ползучести под постоянной нагрузкой при высоких температурах и др.) описываются как независимые специфические процессы, не имеющие общей природы.

На микромасштабном уровне физиками разрабатывается теория деформационных дефектов в деформируемой кристаллической решетке. Методология механики сплошной среды сохраняется неизменной: движение дефектов в деформируемом кристалле происходит под действием средних приложенных напряжений. Основная цель микромасштабного подхода – дать физическую интерпретацию пластических сдвигов на основе представлений теории дислокаций и дисклинаций.

Однако в традиционных подходах физики и механики деформируемого твердого тела было два принципиально важных недостатка:

1. Деформируемое твердое тело описывалось в рамках одноуровневого подхода: либо только на макромасштабном уровне, либо только на микромасштабном уровне.

2. В теории дислокаций рассматривались только связанные с дислокациями поля внутренних напряжений, в то время как зарождение дислокаций не рассматривалось, а ядра дислокаций не учитывались. В ядрах происходят локальные структурные превращения исходной кристаллической решетки, определяющие физику зарождения и движения дислокаций на атомном уровне.

Указанные недостатки определили ошибочность традиционной методологии физики и механики деформируемого твердого тела и пришли в противоречие с экспериментальными результатами, полученными на мезомасштабных уровнях. Использование приборов новых поколений, сочетающих высокую разрешающую способность с возможностью сканирования больших площадей рабочей поверхности деформируемого образца, позволило вскрыть широкий спектр мезомасштабных уровней пластического течения, которые не учитываются в механике сплошной среды и теории дислокаций. Стало очевидным, что деформируемое твердое тело есть иерархически организованная многоуровневая система, в которой пластическое течение самосогласованного развивается на нано-, микро-, мезо- и макромасштабном уровнях. Учет локальных структурных превращений в зоне пластического сдвига потребовал кардинального изменения существующей методологии описания деформируемого твердого тела. В рамках новой методологии зарождения и развития пластического течения не связывается со средним приложенным напряжением, не влияющим на структурное превращение деформируемого кристалла в целом. При генерации дислокаций, дисклинаций, мезо- и макрополос локализованной деформации происходят локальные структурные превращения, связанные с концентраторами напряжений на различных масштабных уровнях. Обоснование их возникновения возможно

только при многоуровневом подходе к описанию поведения деформируемого твердого тела.

Таким образом, в настоящее время значительной проблемой является разработка методологии описания деформируемого твердого тела как иерархически организованной многоуровневой системы. Решению данной проблемы посвящено новое научное направление – физическая мезомеханика, имеющая весьма важные приложения в таких областях, как физика, механика, физическое материаловедение, химия и т.д.

При нагружении твердого тела выше предела упругости происходит локальная потеря его сдвиговой устойчивости, определяющая пластическую деформацию. Исходя из этого, при описании пластического течения следует прежде всего осуществлять системный анализ сдвиговой устойчивости всех подсистем деформируемого твердого тела: кристаллической решетки основного материала, всех его фаз, внутренних границ раздела и поверхностных слоев. Анализ электронной подсистемы является весьма важным для понимания механизма отклика нагруженного твердого тела. При возмущении электронной подсистемы возникают локальные концентраторы напряжений, порождающие все виды деформационных дефектов.

Известно, что поверхностный слой нагруженного твердого тела, рассматриваемый как специфическое состояние вещества, имеет наименьшую сдвиговую устойчивость. Атомы у поверхности лишены половины межатомных связей, что обеспечивает особую структуру поверхностного слоя: наличие ступенек и террас, повышенную концентрацию вакансий (а значит, увеличенный атомный объем), разнообразие атомных конфигураций, в том числе тех, которые не содержатся в основном объеме кристалла, а также значительное смягчение его фононного спектра. Наличие различных атомных конфигураций говорит о том, что поверхностный слой толщиной в несколько межатомных расстояний нужно рассматривать как систему кластеров, поведение которой принципиально

отличается от поведения равновесного кристалла с трансляционной симметрией. Вследствие этого при нагружении твердого тела потеря сдвиговой устойчивости поверхностного слоя является более интенсивной по сравнению с основным объемом материала. Кластерная система поверхности приводит к проявлению особых механизмов пластической деформации не дислокационной природы.

Как было сказано выше, любой пластический сдвиг ассоциируется со структурным превращением в локальной области нагруженного твердого тела и поэтому должен рассматриваться как локальный структурно-фазовый переход. Термодинамика структурно-фазового перехода такова, что в нагруженном кристалле возникает критический мезообъем неравновесных состояний, в результате чего возникает зародыш новой «фазы» и генерируется деформационный дефект. При этом термодинамическая стабильность деформируемого твердого тела сохраняется. Сформулированная проблема может быть решена в рамках термодинамического подхода, который требует учета двух важных факторов:

1. В локальных областях стабильного кристалла возникают мезообъемы неравновесных состояний, где происходят структурно-фазовые переходы;

2. Растягивающие и сжимающие нормальные напряжения на более высоком масштабном уровне распределены неоднородно. Зоны растягивающих нормальных напряжений являются теми областями, где возможно возникновение неравновесного состояния при сохранении термодинамической стабильности кристалла в целом.

Термодинамическое обоснование зарождения пластического сдвига как локального структурно-фазового перехода возможно только в рамках многоуровневого подхода физической мезомеханики.

2. Объект и методы исследования

2.1 Объект исследования

В металле паропроводов ТЭС на различных стадиях изготовления и эксплуатации происходит накопление и развитие микродефектов, которые могут приводить к возникновению макротрещин и разрушению конструкции в целом [31]. При этом, накопление рассеянных повреждений и особенно их локализация в условиях эксплуатационного нагружения в состоянии упругости требует дополнительного изучения [32-33]. Имитация эксплуатационных дефектов надрезами различной формы диктует, во-первых, привлечение фундаментальных аналитических подходов и численных решений, а во-вторых – необходимость учета свойств и микроструктуры материала, особенно в условиях ударного нагружения [34-36].

В свете вышесказанного особую актуальность приобретают исследования влияния напряженно деформированного состояния материала на микромеханизмы его разрушения [37,38]. Модели деформирования и разрушения, основанные на силовых критериях механики трещин, не всегда учитывают специфику деформирования образцов с различными радиусами надреза [39-41].

Влияние вида напряжено-деформированного состояния, в частности, локализация напряжений в вершине дефекта проявляется, прежде всего, через формирование зоны пластической деформации в области вершины трещины, что предполагает упругопластическую постановку задачи [42-46]. В этой связи актуальным становится развитие энергетических и деформационных параметров и критериев оценки трещиностойкости при различных напряженно-деформированных состояниях, основанных на упругопластическом анализе области вершины трещины при соответствующем учете граничных условий [47-48]. В настоящей работе предлагается провести исследование влияние формы надреза на распределение напряженно-деформированного состояния.

2.2 Метод исследования

2.2.1 Основы многоуровневого подхода к компьютерному моделированию процессов зарождения и роста усталостных трещин на базе термодинамических принципов физической мезомеханики

В настоящее время коллективом авторов разработан и хорошо аттестован метод возбудимых клеточных автоматов. В рамках данного метода исходя из соотношения Торнбулла рассчитывается скорость потока вещества проходящее через границу $\vec{v}_{ik}^{n-1}$ под напряжением $\vec{\sigma}_{ik}^{n-1}$:

$$\vec{v}_{ik}^1 = m_{ik} \cdot \vec{\sigma}_{ik}^1 \quad (36)$$

Где m_{ik} - подвижность материала через границу между i -м элементом и его k -м соседом:

$$m_{ik} = (m_0)_{ik} e^{\frac{Q_{ik}}{k_B T_{ik}}} \quad (37)$$

Здесь $(m_0)_{ik}$ - максимальная подвижность, зависящая от вида материала, которое содержит в каждом из этих элементов:

$$(m_0)_{ik} = \frac{c}{\sqrt{Y_i Y_k}} e^{\frac{Q_{ik}}{Y_k}}, \quad (38)$$

где Y_i , Y_k – модули Юнга i -го и k -го элемента, c – эффективная скорость отклика среды на внешнее механическое воздействие; k_B - постоянная Больцмана; Q_{ik} - энергия границы между рассматриваемыми элементами на $(n-1)$ -м шаге по времени:

$$Q_{ik} = \gamma_{HAGB} \left(\frac{\theta_i}{\theta_{HAGB}} \right)^2 \left(\frac{\theta_k}{\theta_{HAGB}} \right)^2, \quad (39)$$

где γ_{HAGB} – максимальная энергия границы, которая соответствует максимальному углу разориентации кристаллической решётки, θ_{HAGB} – максимальный угол разориентации, θ_i , θ_k – эффективные углы ориентации решётки i -го элемента и его k -го соседа; T_{ik} – величина температуры на рассматриваемой границе, вычисляемая

как среднее арифметическое значение величин температуры данных элементов T_i и T_k :

$$T_{ik} = \frac{T_i + T_k}{2}. \quad (40)$$

В результате, по полученным линейным скоростям переноса вычисляют угловые скорости поворотной моды потока переноса (смотреть рисунок 3):

$$\omega = \frac{\sum_{k,l} \vec{F}_{ikl} \times \vec{V}_{kl}^1}{\sum_{k,l} |\vec{F}_{ikl}|^2}. \quad (41)$$

Далее вычисляются вектор потока вещества в i -й элемент из его k -го соседнего элемента ($\Delta \vec{v}_{ik}^n$) и соответствующий вектор потока механической энергии в i -й элемент через рассматриваемую границу ($\Delta \vec{A}_{ik}^n$):

$$\Delta \vec{v}_{ik}^n = S_c \vec{v}_{ik}^1 \Delta t, \quad (42)$$

$$\Delta \vec{A}_{ik}^n = |\Delta \vec{v}_{ik}^1| \vec{A}_{ik}^1. \quad (43)$$

Здесь Δt – величина временного шага, S_c – площадь границы элементов. В данном случае величина вектора потока вещества $\Delta \vec{v}_{ik}^n$ определяет объём материала, переместившегося через границу в заданном направлении. Исходя из значения вектора потока вещества, можно определить величину относительного изменения количества вещества в i -м элементе при его взаимодействии с k -м соседом ($\Delta \zeta_{ik}^n$):

$$\Delta \zeta_{ik}^n = \frac{(\Delta \vec{v}_{ik}^n) \cdot \vec{A}_{ik}^1}{V_c}, \quad (44)$$

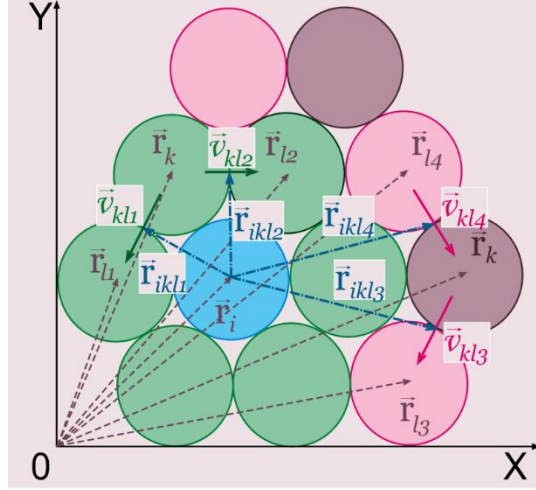
где V_c – объём элемента клеточного автомата.

Затем вычисляются полный вектор потока вещества в i -й элемент ($\Delta \vec{v}_i^n$), полное относительное изменение количества вещества в i -м элементе ($\Delta \zeta_i^n$) и полный вектор потока механической энергии в i -й элемент ($\Delta \vec{A}_i^n$) при взаимодействии со всеми соседними элементами на первой координационной сфере на n -м временном шаге:

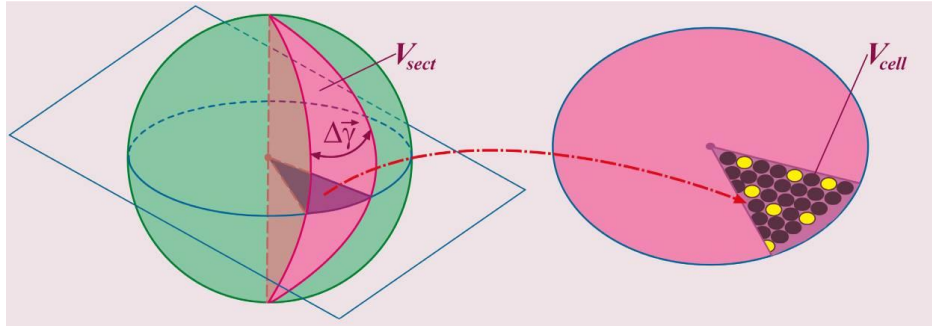
$$\Delta \vec{v}_i^n = \sum_{k=1}^K \Delta \vec{v}_{ik}^n, \quad (45)$$

$$\Delta \vec{A} = \sum_{k=1}^K \Delta \vec{A}_k, \quad (46)$$

$$\Delta \vec{A} = \sum_{k=1}^K \Delta \vec{A}_k. \quad (47)$$



а)



б)

Рисунок 5 – Схема расчета угловой скорости вихря в активном элементе клеточного автомата (двумерный случай) (а) и схема вычисления изменения числа дефектов в элементе при кручении материала (б)

Наконец, вычисляются суммарный вектор потока вещества в i -й элемент ($\vec{v}_i^n$), суммарное относительное изменение количества вещества в i -м элементе (ζ_i^n), суммарный вектор потока механической энергии в i -й элемент ($\vec{A}_i^n$) и суммарный вектор напряжения в центре i -го элемента ($\vec{f}_i^n$), накопленные к n -му временному шагу:

$$\vec{\gamma}_i^n = \vec{\gamma}_i^{n-1} + \Delta \vec{\gamma}_i^n, \quad (48)$$

$$\zeta_i^n = \zeta_i^{n-1} + \Delta \zeta_i^n. \quad (49)$$

$$\vec{A}_i^n = \vec{A}_i^{n-1} + \Delta \vec{A}_i^n, \quad (50)$$

где $[\Delta \vec{A}_d]_i^n$ – диссипационный член энергии микровращений элементов среды, определяемый согласно следующей формуле:

$$[\Delta \vec{A}_d]_i^n = \frac{k_{diss} G_i \Delta \vec{\gamma}_i^n}{2}. \quad (51)$$

Здесь $\Delta \vec{\gamma}_i^n$ – приращение векторного угла разворота элемента среды, $\Delta \vec{\gamma}_i^n = \vec{\alpha} \vec{q}$; G_i – модуль сдвига, k_{diss} – коэффициент диссипации (может быть измерен экспериментально), r_c – радиус активного элемента.

$$\vec{f}_i^n = \frac{\vec{A}_i^n}{V_c}. \quad (52)$$

Значения и $\{\vec{f}_i^n, 0 \leq i \leq I-1\}$ становятся входными параметрами для $(n+1)$ -го временного шага. Выходными параметрами элементов клеточного автомата являются конечные значения напряжений в центрах элементов $\{\vec{f}_i^N, 0 \leq i \leq I-1\}$, где N – общее число временных шагов.

Исходя из выражения для диссипационного члена можно вывести плотность накопления дефектных структур и вероятность зарождения микротрещин. Соотношение (16) позволяет вычислить часть энергии микровращений материала в элементе клеточного автомата, уходящую на образование деформационных дефектов в этом материале. С точки зрения термодинамики, это означает локальное изменение энтропии и температуры:

$$[\Delta S]_i^n = T^{-1} [\Delta \vec{A}_d]_i^n. \quad (53)$$

В рамках классической термодинамики рассматривается два вида процессов: изотермические и изоэнтропийные. Для моделирования изменения обоих параметров предлагается чередование временных шагов с постоянной температурой (нечётные) и постоянной энтропией (чётные).

Таким образом, для нечётного $n = 2m-1$ ($m > 0$) в выражении (53) $\Delta T_i^n = 0$, и изменение энтропии вычисляется следующим образом:

$$S_i^n = S_i^{n-1} = \frac{[A_i]^{n-1}}{T_i^{n-2}}. \quad (54)$$

Величина энтропии i -го элемента на нечётном шаге определяется в виде суммы, при этом его температура не меняется:

$$S_i^n = S_i^{n-1} = S_i^{n-2} + S_i^{n-3}, \quad (55)$$

$$T_i^n = T_i^{n-1} = T_i^{n-2} \quad (56)$$

При чётном $n = 2m$ в формуле (53) $\Delta S_i^n = 0$, а $S_i^{n+1} = S_i^{2m+1}$, что позволяет получить выражение для ΔT_i^{2m} :

$$T_i^n = T_i^{2n} = \frac{[A_i]^{2n}}{S_i^{2n+1}}. \quad (57)$$

Энтропия i -го элемента на чётном шаге остаётся прежней, а его температура увеличится на ΔT_i^{2m} :

$$S_i^n = S_i^{2n} = S_i^{2n+1}, \quad (58)$$

$$T_i^n = T_i^{2n} = T_i^{2n+1} + \Delta T_i^{2m}. \quad (59)$$

Значение T_i^{2m} используется на следующем нечётном шаге для вычисления изменения энтропии согласно (65).

Зная значение плотности ρ_i^{n-1} и изменение объёма материала ΔV_i^n , можно вычислить изменение массы материала $\Delta \mu_i^n$ и её новое значение μ_i^n для i -го элемента:

$$\Delta \mu_i^n = \frac{\mu_i^{n-1} \Delta V_i^n}{V_i^{n-1}}, \quad (60)$$

$$\mu_i^n = \mu_i^{n-1} + \Delta \mu_i^n. \quad (61)$$

Новые значения плотности материала, содержащегося в i -м элементе (ρ_i^n), и его гидростатического давления (P_i^n) определяются выражениями:

$$\rho_i^n = \frac{\mu_i^{n-1} + \Delta \mu_i^n}{V_i^{n-1} + \Delta V_i^n}, \quad (62)$$

$$p_i^n = \frac{E_i^n}{\Lambda_c} \quad (63)$$

Изменение числа дефектов в элементе (Δn) при кручении содержащегося в нём материала на угол $\Delta\gamma$ определяется исходя из того, какое количество элементарных ячеек кристаллической решётки попало в сектор, соответствующий этому углу (смотреть рисунок 3б):

$$\Delta n = k \frac{V_{sect}(\Delta\gamma)}{V_{cell}}, \quad (64)$$

где $V_{sect}(\Delta\gamma)$ – объём сектора, соответствующего углу $\Delta\gamma$; V_{cell} – объём элементарной ячейки; k – коэффициент пропорциональности, зависящий от типа упаковки атомов, величины энергии межатомного взаимодействия и других факторов, характеризующих данный материал.

Величина объёма сектора $V_{sect}(\Delta\gamma)$ определяется следующим выражением:

$$V_{sect}(\Delta\gamma) = \frac{\Delta\gamma}{3} r_c^3. \quad (65)$$

Подставляя выражение (65) в (64), получаем:

$$\Delta n = k \frac{\Delta\gamma r_c^3}{3 V_{cell}}. \quad (66)$$

Полученное соотношение (66) позволяет вычислять изменение количества дефектов в материале при формировании кривизны под действием локального момента силы:

$$n = n^0 + \Delta n. \quad (67)$$

2.2.2 Моделирование циклического нагружения в рамках метода возбудимых клеточных автоматов

На рисунке 6 представлена схема изменения коэффициента диссипации механической энергии в зависимости от поведения напряжения в элементе клеточного автомата. Представленный на этой схеме график состоит из 4 частей.

1. На упругой стадии коэффициент диссипации энергии является константой:

$$k_{diss} = k_1. \quad (68)$$

Этот случай соответствует линейной зависимости напряжения от деформации на рисунке 5.

2. Если величина растущего напряжения σ превысила предел упругости σ_1 , то элемент переходит в пластическое состояние, и коэффициент диссипации энергии определяется по формуле

$$k_{diss} = k_1 \cdot \sigma / \sigma_1, \quad (69)$$

т.е. происходит монотонный рост коэффициента диссипации энергии, в результате чего всё большее количество поступающей механической энергии уходит на производство энтропии (рост плотности дефектов). Этот процесс приводит к отклонению графика « $\sigma - \epsilon$ » на рисунке 7 от линейной зависимости. В данном случае степень производства энтропии определяется диссипационным членом энергии микровращений материала $[\Delta E_d]_i^n$, определяемым согласно формуле (51).

3. При падении напряжения на стадии пластичности коэффициент диссипации становится постоянным:

$$k_{diss} = k_3, \quad (70)$$

что обуславливает монотонное уменьшение деформации на рисунке 7.

Если падение напряжения на пластической стадии приводит к тому, что $\sigma < \sigma_2$, то

$$k_{diss} = k_4 + (k_3 - k_4)\sigma / \sigma_2, \quad (71)$$

где $\sigma_2 \leq \sigma_1$, при этом элемент стремится вернуться в упругое состояние. В таком случае снижение деформации на участке 4 графика 7 ускоряется, в результате при $\sigma = 0$ имеем остаточную деформацию $\varepsilon = \varepsilon_{ост}$.

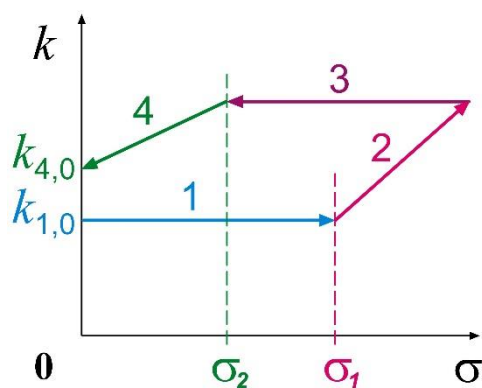


Рисунок 6 – Схема изменения коэффициента диссипации механической энергии в зависимости от напряжения

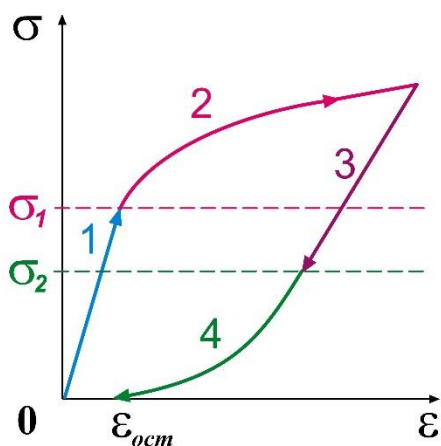


Рисунок 7 – Схема влияния изменения коэффициента диссипации на кривую зависимости напряжения от деформации

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
4Б21	Беспалов Александр Сергеевич

Институт	Физики высоких технологий	Кафедра	Материаловедение в машиностроении
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Материаловедение и технологии материалов

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	-Проект выполняется в кабинете ИФПМ СО РАН -Приблизительная сумма затрат на выполнение проекта составляет 200 тысяч рублей -В реализации проекта задействованы 2 человека руководитель проекта, студент-дипломник
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	-Данная НИР новая, следовательно нормы и нормативы расходования ресурсов отсутствуют -Минимальный размер оплаты труда (на 2016 год) составляет 6675 руб
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	-Согласно п.3 п.п.16 ст. 149 НК РФ данная НИР не подлежит налогообложению - Отчисления во внебюджетные фонды – 27,1 % от ФОТ

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения исследовательской работы</i>	-Технико-экономическое обоснование научно-исследовательской работы - SWOT-анализ
2. <i>Планирование процесса управления НИР: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	-Планирование работ по научно-техническому исследованию; -Смета затрат на разработку исследования
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	- Оценка научно-технического уровня следования, - Оценка рисков

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НИР
2. Матрица SWOT
Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИР

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры менеджмента	Грахова Елена Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Б21	Беспалов Александр Сергеевич		

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Разработка НИР производится группой квалифицированных работников, состоящей из двух человек – руководителя и студента.

Темой научной исследовательской работы является компьютерное моделирование ударного нагружения систем с концентраторами напряжений в виде надреза.

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспективности и успешности НТИ, оценка его эффективности, уровня возможных рисков, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

Для достижения обозначенной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Оценить коммерческий потенциал и перспективность разработки НТИ;
2. Осуществить планирование этапов выполнения исследования;
3. Рассчитать бюджет затрат на исследования;
4. Произвести оценку научно-технического уровня исследования и оценку рисков.

К научно-исследовательским работам относятся работы поискового, теоретического и экспериментального характера, которые выполняются с целью расширения, углубления и систематизации знаний по определенной научной проблеме и создания научного задела.

4.1. Технико-экономическое обоснование НИР

Компьютерные технологии стали использоваться во многих сферах деятельности человека, так как затрачивается меньше времени и энергии. Данная работа проведена с помощью компьютерного моделирования и способна рассматривать микротрещины на мезомасштабном уровне, что приводит к большой экономии средств по сравнению с практическими экспериментами.

Рассматриваемое направление является крайне актуальным для множества технических приложений, включая повышение срока службы деталей машин в условиях крайнего севера, износостойкость и трещиностойкость материалов для авиационной промышленности и пр.

Коммерческого потенциала у данного исследования нет, поскольку оно выполняется в рамках ВКР и в большей степени олицетворяет теоретическую значимость полученных результатов.

Произведем также в данном разделе SWOT-анализ НТИ, позволяющий оценить факторы и явления способствующие или препятствующие продвижению проекта на рынок. [49] В таблице 1 описаны сильные и слабые стороны проекта, выявлены возможности и угрозы реализации НТИ, которые могут появиться в его внешней среде.

Таблица 1 – SWOT-анализ НИР

Сильные стороны	Возможности во внешней среде
С1.Метод компьютерного моделирования ударного нагружения систем с концентраторами напряжений в виде надреза является принципиально новым; С2.Метод, описанный в работе, несет в себе экономичность и ресурсоэффективность; С3.Возможность применения данного метода, для любых материалов; С4.Актуальность метода; С5.Наличие опытного руководителя.	В1.Простая адаптация научного исследования под иностранные языки; В2.Большой потенциал применения метода в России и других странах;
Слабые стороны	Угрозы внешней среды
Сл1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с данным методом	У1.Отсутствие спроса на новый метод; У2.Закрытие машиностроительных предприятий на территории РФ.

Далее выявим соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

Таблица 2 – сильные стороны проекта

Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	-	+	+	-
	B2	+	+	+	-	-

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить следующие коррелирующие сильные сторон и возможности: B1C1C3C4, B2C1C2C3.

Таблица 3 – слабые стороны проекта

Возможности проекта		Сл1
	B1	0
	B2	0

Таблица 4 – сильные стороны проекта

Угрозы		C1	C2	C3	C4	C5
	Y1	+	+	0	-	0
	Y2	+	0	0	+	0

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить следующие коррелирующие сильные сторон и угроз: Y1C1C2, Y2C1C4.

Таблица 5 – слабые стороны проекта

Возможности проекта		Сл1
	Y1	-
	Y2	0

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить, что коррелирующих слабых сторон нет.

Итак, самой большой угрозой для проекта является отсутствие спроса, что на данном этапе не прогнозируется, поскольку аналогов данному методу нет. Также среди угроз можно отметить низкий темп роста, ведущих отраслей машиностроения, что в свою очередь может привести к закрытию некоторых машиностроительных предприятий.

Что касается слабых сторон, то для данного метода, во избежание их влияния, требуется привлечение опытных кадров, обеспечить обучение нового персонала со знаниями материаловедения, механики и физики.

Таким образом, несмотря на то, что коммерческого потенциала у данного исследования нет и оно в большей степени олицетворяет теоретическую значимость полученных результатов, результаты НТИ (непосредственно моделирования ударного нагружения) актуальны для предприятий, заинтересованных в повышении срока службы деталей машин в условиях крайнего севера, повышении износостойкости и трещиностойкости материалов для авиационной промышленности и пр.

4.2 Планирование работ по научно-техническому исследованию

Для правильного планирования, а также финансирования и определения трудоемкости выполнения НИР необходимо ее разбить на этапы. Под этапом понимается крупная часть работы, которая имеет самостоятельное значение и является объемом планирования и финансирования. НИР имеет:

1. Подготовительный этап. Сбор, изучение и анализ, имеющийся информации. Определение состава исполнителей и соисполнителей, согласование с ними частных задач. Разработка и утверждение задания.

2. Разработка теоретической части.

3. Проведение численного эксперимента

4. Выводы и предложения по теме, обобщение результатов разработки.

5. Завершающий этап. Рассмотрение результатов исследования. Утверждение результатов работы. Подготовка отчетной документации.

Данную НИР можно разделить на следующие этапы (Таблица 6):

- а) Разработка задания на НИР;

- б) Выбор направления исследования;

- в) Теоретические и экспериментальные исследования;

г) Обобщение и оценка результатов;

д) Оформление отчета НИР.

Работу выполняло 2 человека: руководитель, студент-дипломник.

Трудоемкость выполнения НИР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Разделим выполнение дипломной работы на этапы, представленные в таблице 6:

Таблица 6 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ работы	Содержание работы	Должность исполнителя
Разработка задания на НИР	1	Составление и утверждение задания НИР	Моисеенко Д.Д – руководитель; Беспалов А.С. – студент-дипломник.
Проведение НИР			
Выбор направления исследования	2	Изучение метода компьютерного моделирования и поиск материалов по работе	Беспалов А.С.
	3	Выбор образцов для исследования	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.
	4	Календарное планирование работ	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Планирование проведения численных экспериментов	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.
	6	Компьютерное моделирование	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.
	7	Обработка полученных данных	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.
Обобщение и оценка результатов	8	Анализ полученных результатов, выводы	Беспалов А.С.
	9	Оценка эффективности полученных результатов	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.
Оформление отчета НИР	10	Составление пояснительной записки	Беспалов А.С.

4.2.1 Определение трудоемкости этапов НИР

Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человеко-днях по формуле

$$t_{ож\ i} = \frac{3 \cdot t_{\min\ i} + 2 \cdot t_{\min\ i}}{5}, \quad (72)$$

Где $t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

$t_{\min\ i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max\ i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Рассчитаем значение ожидаемой трудоёмкости работы:

Для установления продолжительности работы в рабочих днях используем формулу:

$$T_{pt} = \frac{t_{ож\ i}}{Ч_i}, \quad (73)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для удобства построения календарного план-графика, длительность этапов в рабочих днях переводится в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k, \quad (74)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения одной работы, календ. дн.;

T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

k – коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}}, \quad (75)$$

где $T_{\text{кг}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вд}}$ – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пд}}$ – количество праздничных дней в году.

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}} = \frac{365}{365 - 104 - 10} = 1,45,$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, следует учесть, что расчетную величину продолжительности работ $T_{\text{к}}$ нужно округлить до целых чисел. [50]

Результаты расчетов приведены в таблице 7.

4.2.2 Техническая готовность темы

Определение технической готовности темы позволяет дипломнику точно знать, на каком уровне выполнения находится определенный этап или работа. Показатель технической готовности темы характеризует отношение продолжительности работ, выполненных на момент исчисления этого показателя, к общей запланированной продолжительности работ, при этом следует учесть, что период дипломного проектирования составляет примерно 6 месяцев, дипломник выступает в качестве основного исполнителя.

Для начала следует определить удельное значение каждой работы в общей продолжительности работ:

$$Y_i = \frac{T_{pi}}{T_p} \cdot 100\%, \quad (76)$$

где Y_i – удельное значение каждой работы в %;

T_{pi} – продолжительность одной работы, раб.дн.;

T_p – суммарная продолжительность темы, раб.дн.

Тогда техническую готовность темы Γ_i , можно рассчитать по формуле:

$$\Gamma_i = \frac{\sum_{i=1} T_{pi}}{T_p} \cdot 100\%, \quad (77)$$

где $\sum T_{pi}$ – нарастающая продолжительность на момент выполнения i -той работы. [50]

Результаты расчетов приведены в таблице 7.

Таблица 7 – Временные показатели проведения НИР

№ раб.	Исполнители	Продолжительность работ						
		t_{min} чел- дн.	t_{max} чел-дн	$t_{ож}$ чел- дн	T_p раб.дн	T_k кал.дн	$Y_i, \%$	$\Gamma_i, \%$
1	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	1	3	2	1.2	3	1.72	1.05
2	Беспалов А.С.	23	42	33	27	35	34.35	39.41
3	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	6	11	9	3.8	7	5.32	39.01
4	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	5	13	7	2.8	5	5.65	45,60
5	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	13	21	16	18	34	21.41	69.5
6	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	6	15	7	3	7	3.72	78.26
7	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	7	11	8	3.7	13	6.83	83.32
8	Беспалов А.С.	1	8	4	0.79	4	6.30	87.91
9	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	4	13	7	2.7	6	6.79	92.11
10	Беспалов А.С.	3	9	6	4.1	9	6.02	100
ИТОГО						123		

4.2.3 Построение графика работ

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ. [51]

Таблица 8 – Календарный график проведения НИР

Этапы	Вид работы	Исполнители	T _k	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь
1	Составление и утверждение задания НИР	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	3					
2	Изучение метода компьютерного моделирования и поиск материалов по теме	Беспалов А.С.	35					
3	Выбор образцов для проведения эксперимента	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	7					
4	Календарное планирование работ	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	5					
5	Планирование проведения численных экспериментов	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	34					
6	Компьютерное моделирование ударного нагружения образцов	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	7					
7	Обработка полученных данных	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	13					
8	Анализ полученных результатов, выводы	Беспалов А.С.	4					
9	Оценка эффективности полученных результатов	Моисеенко Д.Д., Беспалов А.С.	6					
10	Составление пояснительной записки, Сдача результатов НИР	Беспалов А.С.	9					

- руководитель, - студент-дипломник.

В результате видно, что для выполнения работы требуется всего 2 человека и работа выполняется в течении 123 дней.

4.3 Смета затрат на разработку проекта

Затраты представляют собой все производственные формы потребления денег и измеримых в денежном измерении материальных ценностей, которые служат непосредственной производственной целью.

Рассчитываем смету расходов, включая затраты на приобретение необходимого оборудования для разработки проекта и текущие расходы. Затраты, образующие себестоимость продукции (работ, услуг), группируются в соответствии с их экономическим содержанием по следующим элементам:

$$K_{\text{проекта}} = I_{\text{мат}} + I_{\text{ам.техн}} + I_{\text{зп}} + I_{\text{соц.отч.}} + I_{\text{накл.расх}} + I_{\text{прочие}}$$

Материальные затраты отражают стоимость приобретенных материалов и сырья, которые входят в состав вырабатываемой продукции, образуя ее основу, или являются необходимыми компонентами при изготовлении продукции. [51]

В данной работе моделирование проводится на компьютере поэтому материальных затрат нет.

Для проведения научно-исследовательской работы требуется компьютер.

Срок полезного использования: компьютер – по третьей группе (техника электронно- вычислительная): 15 лет. [52]

Рассчитываем материальные затраты используется один компьютер стоимостью 167000 рублей

Амортизация основных фондов – сумма амортизационных отчислений на полное восстановление основных производственных фондов, вычисленная исходя из их балансовой стоимости и утвержденных норм амортизации. Корректно при расчете затрат учитывать в году приобретения и в последующие годы только ту часть затрат, которая происходит от старения основных фондов в каждом году. [52]

Рассчитаем амортизацию оборудования техники $I_{\text{ам.обор}}$, по следующей формуле

$$I_{\text{ам. обор}} = \left(\frac{T_{\text{исп. обор}}}{365} \right) \times K_{\text{обор}} \times H_a,$$

где $T_{\text{исп.обор}}$ – время использования оборудование;

365 дней – количество дней в году;

$K_{\text{обор}}$ – стоимость оборудования;

H_a – норма амортизации.

$$H_a = \frac{1}{T_{\text{с.с. обор.}}},$$

где $T_{\text{с.с. обор.}}$ – срок службы оборудования

$$I_{\text{ам. комп}} = \left(\frac{T_{\text{исп. комп}}}{365} \right) \cdot K_{\text{комп}} \cdot H_a = \left(\frac{123}{365} \right) \cdot 167000 \cdot \frac{1}{15} = 3751.7$$

Так как для исследования нужен только компьютер, то $I_{\text{ам. комп}} = I_{\text{ам. обор}}$

Расчет заработной платы – заработная плата рассчитывается в соответствии с занятостью исполнителей, с учетом районного и тарифного коэффициентов исполнителей.

В состав затрат на оплату труда включаются:

- выплаты заработной платы за фактически выполненную работу;
- выплаты стимулирующего характера по системным положениям;
- выплаты по районным коэффициентам;
- компенсации за неиспользованный отпуск;
- другие виды выплат. [53]

Примем, что полный фонд заработной платы ($\Phi_{\text{зп}}$):

$$\Phi_{\text{зп}} = 28000 \text{руб},$$

Отчисления на социальные нужды выражаются в виде единого социального налога, который включает в себя: обязательные отчисления по установленным

законодательством нормам органам государственного социального страхования, пенсионного фонда, государственного фонда занятости и медицинского страхования.

Единый социальный налог – 27.1%.

Рассчитываем отчисления на социальные нужды ($I_{\text{соц.отч.}}$):

$$I_{\text{соц.отч}} = ЕСН = 0,26 \cdot \Phi_{\text{зп}} = 0,26 \cdot 28000 = 7280 \text{ руб.}$$

Накладные расходы используют на следующее:

- 1) Затраты на текущий ремонт;
- 2) Амортизацию основных производственных фондов;
- 3) Затраты на охрану труда и пожарную безопасность.

Для проектных отделов накладные затраты составляют 200% от полного фонда заработной платы Тогда: $I_{\text{накл.расх.}} = 2 \cdot \Phi_{\text{зп}} = 2 \cdot 28000 = 56000 \text{ руб.}$

Прочие затраты – затраты, к которым относятся налоги, сборы, отчисления в специальные внебюджетные фонды, платежи по обязательному страхованию имущества, вознаграждения за изобретение и рационализаторские предложения, за подготовку кадров, оплата услуг связи и т.д. Эти затраты составляют 2% от всех издержек и вычисляются по формуле:

$$I_{\text{прочее}} = 0.02 \cdot (I_{\text{ам.обор}} + \Phi_{\text{зп}} + ЕСН) = 0.02 \cdot (3751.7 + 28000 + 7280) = 39031.7$$

Рассчитываем себестоимость проекта ($K_{\text{проекта}}$):

$$K_{\text{проекта}} = I_{\text{ам.обор}} + \Phi_{\text{зп}} + I_{\text{прочее}} + I_{\text{накл.расх}} + I_{\text{соц.отч}} = 3751.7 + 28000 + 39031.7 + 56000 + 7280 = 134063.4$$

Рассчитываем плановые накопления (ПР). Стоимость проекта включает в себя 30% прибыли, таким образом:

$$ПР = 0.3 \cdot K_{\text{проекта}} = 0.3 \cdot 134063.4 = 40219.02$$

Рассчитываем стоимость проекта (Π).

$$\Pi = K_{\text{проекта}} + ПР = K_{\text{проекта}} + ПР = 134063.4 + 40219.02 = 174282.4$$

Таблица 9 – Смета затрат на научно-исследовательскую работу

Виды затрат	Обозначение	Сумма затрат, руб.
Амортизация оборудования	$I_{ам,обор}$	3751.7
Затраты на оплату труда	ЗП	28000
Отчисления на социальные нужды	$I_{соц.отч}$	7280
Накладные расходы	$I_{накл.расх}$	56000
Прочие затраты	$I_{прочие}$	39031.7
Себестоимость проекта	$K_{проекта}$	134063.4
Плановые накопления (прибыль)	ПР	40219.02
Стоимость проекта (цена)	Ц	174282.4

Исходя из расчетов и полученных результатов приведенных в таблице 9, можно сделать вывод, что данная научно исследовательская работа входит в обозначенные бюджетные ограничения, так как стоимость проекта равная 174282.4 рублей, меньше приблизительной суммы затрат равной 200 тысяч рублей.

4.4 Оценка целесообразности исследования

4.4.1 Оценка научно-технического уровня следования

Для определения научно - технического уровня проекта, его научной ценности, технической значимости и эффективности необходимо, рассчитать коэффициент научно-технического уровня (НТУ).

Коэффициент НТУ рассчитывается при помощи метода балльных оценок. Суть метода состоит в присвоении каждому из признаков НТУ определенного числа баллов по принятой шкале. Общую оценку приводят по сумме баллов по всем показателям с учетом весовых характеристик.

Формула для определения общей оценки:

$$НТУ = \sum_{i=1}^n k_i * \Pi_i$$

где k_i – весовой коэффициент i – го признака;

Π_i – количественная оценка i – го признака.

Таблица 10 – Весовые коэффициенты НТУ

Признаки НТУ	Весовой коэффициент
Уровень новизны	0.8
Теоретический уровень	0.6
Возможность реализации	0.3

Таблица 11 – Шкала оценки новизны

Баллы	Уровень
1-4	Низкий НТУ
5-7	Средний НТУ
8-10	Сравнительно высокий НТУ
11-14	Высокий НТУ

Таблица 12 – Значимость теоретических уровней

Характеристика значимости теоретических уровней	Баллы
Разработка нового метода	10
Глубокая разработка проблем, многосторонний анализ	8
Разработка численных экспериментов	6
Элементарный анализ результатов исследования	3

Таблица 13 – Возможность реализации по времени и масштабам

Время реализации	Баллы
В течение первых лет	10
От 5 до 10 лет	5
Свыше 10 лет	3

Расчет НТУ:

$$\text{НТУ} = \sum_{i=1}^n k_i * \Pi_i$$

где $k_1 = 0.8$; $k_2 = 0.6$; $k_3 = 0.3$;

$\Pi_1 = 9$; $\Pi_2 = 6$; $\Pi_3 = 4$;

$$\text{НТУ} = 0.8*9+0.6*6+0.3*4 = 12.$$

По полученным значениям коэффициент научно-технического уровня (НТУ) можно сказать о достаточно высоком научно - техническом уровне исследования, его научной ценности, технической значимости и эффективности.

4.4.2 Оценка возможных рисков

Произведем оценку рисков. Определение рисков является одним из важнейших моментов при создании проекта. Учет рисков даст возможность избежать опасные факторы, которые негативно отражаются на внедрении в жизнь проекта.

При оценке важности рисков оценивается вероятность их наступления (P_i). По шкале от 0 до 100 процентов: 100 – наступит точно, 75 – скорее всего наступит, 50 – ситуация неопределенности, 25 – риск скорее всего не наступит, 0 – риск не наступит. Оценка важности риска оценивается весовым коэффициентом (w_i). Важность оценивается по 10- балльной шкале b_i . Сумма весовых коэффициентов должна равняться единице. Оценка важности рисков приведена в таблицах 14-18.

Таблица 14 – Социальные риски

№	Риски	P_i	b_i	w_i	$P_i \cdot w_i$
1	Низкая квалификация персонала	0	2	0.061	0
2	Непросвещенность предприятий о данном методе	50	4	0.168	8.928
3	Несоблюдение техники безопасности	25	6	0.23	6.25
4	Увеличение нагрузки на персонал	50	4	0.168	8.928
	Сумма		16	0.627	24.1

Таблица 15 – Экономические риски

№	Риски	P_i	b_i	w_i	$P_i \cdot w_i$
1	Инфляция	100	2	0.029	1.960
2	Экономический кризис	25	3	0.049	0.980
3	Непредвиденные расходы в плане работ	25	5	0.126	5.862
4	Сложность выхода на мировой рынок	75	6	0.136	10.29
	Сумма		16	0.34	19.92

Таблица 16 – Технологические риски

№	Риски	P_i	b_i	w_i	$P_i \cdot w_i$
1	Возможность поломки оборудования	25	6	0.24	5.25
2	Низкое качество поставленного оборудования	25	8	0.313	7.0357
	Сумма		14	0.553	12.2857

Таблица 17 – Научно-технические риски

№	Риски	P_i	b_i	w_i	$P_i \cdot w_i$
1	Развитие конкурентных методов	50	5	0.135	8.936
2	Отсутствие результата в установленные сроки	25	6	0.123	6.25
3	Несвоевременное патентование	25	8	0.176	3.657
	Сумма		19	0.434	18.843

Таблица 18 – Общие риски

№ п/п	Риски	b_i	w_i	$b_i \cdot w_i$
1	Социальные	16	0.627	10.03
2	Экономические	16	0.34	5.44
3	Технологические	14	0.553	7.742
4	Научно-технические	19	0.434	8.246
Итого				31.458

Расчет рисков дает общую оценку в 31.458. Эта цифра говорит, что проект имеет право на жизнь, хотя и не лишен вероятных препятствий.

В ходе выполнения раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» были решены следующие задачи:

1) Проведена оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования на примере SWOT-анализа, результат которого показал большой потенциал применения методики.

2) Определен полный перечень работ, проводимых при компьютерном моделировании. Определена трудоемкость проведения работ. Ожидаемая трудоемкость работ для научного руководителя и студента-исполнителя составила

97 чел-дней. Общая максимальная длительность выполнения работы составила 123 календарных дней.

3) Суммарный бюджет затрат НИР составил – 174282.4 рублей.

4) Определена целесообразность и эффективность научного исследования путем оценки научно-технического уровня проекта, а также оценки возможных рисков. В результате проводимое исследование имеет высокую значимость теоретического уровня и приемлемый уровень рисков.

Следует отметить важность для проекта в целом, проведенных в данной главе работ, которые позволили объективно оценить эффективность проводимого научно-технического исследования.

В завершении хочется отметить, что данный проект, а именно компьютерное моделирование ударного нагружения систем с концентраторами напряжений в виде надреза, является весьма актуальной.

Заключение

В ходе выполнения исследовательской работы были проведены численные эксперименты по одноосному ударному нагружению образцов с тремя формами надрезов (U-образным, V-образным и I-образным).

Анализ результатов исследовательской работы позволил вскрыть взаимосвязь величины концентрации напряжений и локальных моментов сил. Показано, что локальные моменты сил, являющие стоками энергии, способны снижать уровень напряжений вблизи концентратора в виде надреза. Детальный анализ распределения моментов сил вблизи концентратора напряжений позволил вскрыть взаимосвязь ротационных мод деформации на различных масштабных уровнях. Релаксация напряжений осуществляется наиболее эффективно, когда модуляция различных компонент момента происходит на разных масштабных уровнях. Этот факт дает возможность существенно снижать концентрацию напряжений посредством создания кристаллических структур с управляемыми параметрами. Исследованию влияния трехмерной кристаллической структуры на распределение моментов сил и релаксацию напряжений вблизи концентратора будет посвящен следующий этап исследований.

Благодарности

Автор работы благодарит заведующего лабораторией Физической мезомеханики и неразрушающих методов контроля академика РАН В.Е. Панина за формулировку общего направления работ и предоставленную возможность проводить исследования на базе И ФПМ СО РАН, заведующего лабораторией Механики полимерных композиционных материалов д.т.н. С.В. Панина за предоставленный экспериментальный материал и многочисленные консультации, а также н.с. ИФПМ СО РАН П.В. Максимова за неоценимую помощь в постановке численных экспериментов и обработке результатов.