

На правах рукописи



Фролова Ксения Петровна

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ДЕФОРМИРУЕМОГО
ТЕЛА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ МАССОПЕРЕНОСА

Специальность 1.1.8 (ранее 01.02.04) –
Механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем машиноведения Российской академии наук

Научный руководитель: **Вильчевская Елена Никитична**,
доктор физико-математических наук, ведущий
научный сотрудник лаборатории прикладных
исследований ФГБУН Института проблем
машиноведения Российской академии наук

Официальные оппоненты: **Греков Михаил Александрович**,
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры вычислительных методов
механики деформируемого тела факультета
прикладной математики – процессов управления
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государ-
ственный университет»

Келлер Илья Эрнстович,
доктор физико-математических наук, заве-
дующий лабораторией нелинейной механики
деформируемого твердого тела Института
механики сплошных сред Уральского отделения
Российской академии наук – филиала ФГБУН
Пермского федерального исследовательского
центра УрО РАН

Ведущая организация: ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет»

Защита состоится «16» июня 2022 г. в 16 часов 00 минут на заседании диссер-
тационного совета Д 002.075.01 при ФГБУН Институте проблем машиноведе-
ния Российской академии наук по адресу: 199178, Санкт-Петербург, Большой
пр. В.О., д. 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ ФГБУН Института проблем
машиноведения Российской академии наук и на сайте института по адресу
<http://www.ipme.ru>.

Автореферат разослан «___» _____ 2022 г.

Врио ученого секретаря
диссертационного совета Д 002.075.01
доктор технических наук



Е.Б. Седакова

Общая характеристика работы

Актуальность и степень разработанности темы. Микроструктура материала оказывает влияние на массоперенос и распределение диффундирующего вещества в матрице. Развитие промышленности способствовало созданию новых материалов со сложной структурой, деградация механических свойств которых может наблюдаться даже при малых концентрациях вредных примесей, наиболее распространенной из которых является водород.

Работа посвящена развитию моделей механики сплошных сред, интегральным образом учитывающих влияние микроструктуры на характеристики массопереноса в твердом теле.

В настоящее время имеются различные подходы, позволяющие установить взаимосвязь между поведением материала на разных масштабных уровнях. Макроскопические (эффективные) свойства материала с заданной микроструктурой могут быть определены через фиксированные микроструктурные параметры. Методы определения эффективных свойств были предложены и развиты З. Хашином, С. Штрикманом, Т. Мори, К. Танакой, Дж.К. Максвеллом, Р. Кристенсенем, С.К. Канауном, В.М. Левиным, И. Севостьяновым и М.Л. Качановым. На сегодняшний день опубликовано большое количество работ, посвященных определению эффективных упругих и проводящих свойств композитов. Принципиальным отличием задачи диффузии от задач проводимости является наличие сегрегации, под которой подразумевается накопление диффундирующего вещества на границе раздела фаз или внутри неоднородностей, что приводит к скачку концентрации, тогда как в случае проводимости задаются непрерывные граничные условия. Сегрегация была учтена в работах Ю.Р. Калнина, И.В. Беловой, Г.Е. Мерча при рассмотрении наиболее простых методов гомогенизации и геометрии микроструктуры. Более сложные модели рассматривались А.Г. Князевой и И. Севостьяновым, при этом наличие сегрегации было учтено не на всех этапах решения задачи гомогенизации. Для полноценного учета сегрегации необходимо дальнейшее обобщение существующих методов гомогенизации.

Эффекты, проявляющиеся на масштабах, сопоставимых с размерами структурной неоднородности, могут быть описаны с помощью теории обобщенных сред. Механика микрополярных и микроморфных сред получила развитие в основополагающих работах Э.Л. Аэро, Р.Д. Миндлина, Р.А. Тупина, А.К. Эрингена, В.И. Ерофеева, Л.М. Зубова и др. Среды с внутренними степенями свободы изучались также М.А. Гузовым, И.А. Куниным, В.П. Мясниковым. Градиентная теория была сформулирована в работах Р.Д. Миндлина, Р.А. Тупина и развита С.А. Лурье, Э.Х. Айфантисом и др. Для моделирования массопереноса в обобщенных средах требуется установление взаимосвязи между этим процессом и процессами, происходящими на мезоуровне.

Развитие такого подхода к учету микроструктуры позволит в том числе описать поверхностный эффект при диффузии, при котором может наблюдаться существенное локальное увеличение концентрации в поверхностном слое.

Зависимость диффузии от характеристик микроструктуры может быть учтена в определяющем соотношении для диффузионного потока. Наиболее строгий подход к построению определяющего соотношения основывается на рассмотрении двухкомпонентной среды, состоящей из подвижной примеси и твердого тела. Поток выражается через относительную скорость примеси и зависит, помимо градиента концентрации, от целого ряда параметров – в том числе, от напряжений в среде и силы взаимодействия между компонентами. Получить точное решение сложного нелинейного кинетического уравнения для потока затруднительно, что приводит к необходимости использования упрощающих анализ предположений. В работах Д.А. Индейцева, Ю.А. Мочаловой, А.К. Беляева делаются предположения о характере внутренних сил взаимодействия. Для учета влияния напряженно-деформированного состояния на процесс диффузии определяющее соотношение для потока зачастую строится исходя из принципов неравновесной термодинамики, основные положения изложены в работах Х. Мерера, А.Г. Князевой.

Учет влияния структурных особенностей материала на массоперенос с помощью существующих моделей диффузии требует установления взаимосвязи между микроструктурой и такими характеристиками массопереноса, как эффективные коэффициенты диффузии и связанные с напряженно-деформированным состоянием термодинамические силы, инициирующие дополнительные диффузионные потоки. Непосредственно учет микроструктуры может реализовываться в рамках различных подходов. Применение методов микромеханики позволяет оценивать напрямую влияние заданной микроструктуры на макроскопические свойства материала, тогда как построение моделей обобщенных сред позволяет описывать размерные эффекты.

Целью работы является анализ влияния микроструктуры деформируемого твердого тела на характеристики процесса массопереноса на основе моделей механики сплошных сред и моделирование диффузии в среде со сложной структурой в рамках континуальных подходов.

Основными задачами работы являются:

1. Определение эффективных диффузионных свойств трансверсально-изотропного пористого материала с учетом эффекта сегрегации как частного случая неидеального контакта на границе раздела фаз композита.
2. Определение неоднородного напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра с учетом взаимодействия структурных неоднородностей материала в рамках микрополярной теории упругости.

3. Разработка моделей диффузии с учетом влияния неоднородной микроструктуры деформируемого твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.

Методы исследования. В работе использовались методы механики сплошных сред. При определении эффективных свойств композита использовались методы гомогенизации. Моделирование поведения материала осуществлялось в рамках классической и микрополярной теории упругости. При описании диффузионных процессов применялись модели диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния. Численное решение основывалось на применении метода конечных разностей.

Научная новизна.

1. Определен вклад изолированной сфероидальной неоднородности в диффузионные свойства материала при наличии скачка концентрации (сегрегации) на границе раздела фаз композита. Наличие скачка концентрации впервые учтено на всех этапах решения задачи гомогенизации: при осреднении полей и при нахождении тензора концентрации. Построены границы эффективных диффузионных свойств с учетом эффекта сегрегации. Методы эффективного поля обобщены для учета эффекта сегрегации при определении эффективной диффузионной проницаемости композита.
2. Определены эффективные коэффициенты диффузии в трансверсально-изотропном пористом материале, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией пор, с учетом эффекта сегрегации.
3. Разработан новый подход для описания поверхностных эффектов, основанный на полученном в рамках микрополярной теории упругости решении краевой задачи для длинного цилиндра при задании на боковой поверхности распределенного момента или микроповоротов, моделирующих взаимодействие структурных неоднородностей материала.
4. Модели диффузии с учетом влияния напряженно-деформированного состояния уточнены для описания диффузии в твердом теле с неоднородной микроструктурой, учитываемой в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.
5. Разработаны новые численные методы для решения нелинейных связанных задач об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра и распределения диффундирующего вещества с учетом неоднородной микроструктуры твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории.
6. Разработан новый подход для описания наблюдаемого экспериментально поверхностного эффекта при насыщении стальных изделий водородом, при котором практически весь водород аккумулируется в тонком

слое порядка характерного размера структурной неоднородности материала.

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные в работе результаты позволяют описать массоперенос в деформируемых твердых телах со сложной микроструктурой. Построение концентрационных профилей способствует выявлению областей с повышенным содержанием диффундирующего вещества. Полученные результаты могут быть использованы на практике при описании водородной деградации металлов и сплавов. Предложенный в работе подход позволяет описать малоисследованный поверхностный эффект при насыщении сталей водородом, влияющий на механизмы водородной деградации. Помимо этого, результаты работы могут быть использованы при определении свойств горных пород и при разработке новых функциональных материалов с внутренней структурой.

Положения, выносимые на защиту

1. Определен вклад изолированной сфероидальной неоднородности в диффузионные свойства материала при наличии скачка концентрации на границе раздела фаз композита, являющегося частным случаем неидеального контакта. Построены границы эффективных диффузионных свойств гетерогенного материала с учетом эффекта сегрегации, заключающегося в скачке концентрации на границе раздела фаз. Методы эффективного поля обобщены для учета эффекта сегрегации.
2. Определены эффективные коэффициенты диффузии в трансверсально-изотропном пористом материале, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией пор, с учетом характерного для процесса диффузии эффекта сегрегации.
3. Получено решение краевой задачи об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра в рамках микрополярной теории упругости при задании неклассического граничного условия на боковой поверхности, на основании чего разработан подход к описанию поверхностных эффектов различной природы, связанных с наличием структурной неоднородности материала.
4. В рамках микромеханики и микрополярной теории установлена взаимосвязь между микроструктурой материала и его напряженно-деформированным состоянием, расширяющая область применения моделей диффузии, учитывающих влияние полей напряжений и деформаций. Проведен анализ влияния неоднородной микроструктуры пористого материала на процесс диффузии. Проведен анализ влияния неоднородного напряженно-деформированного состояния микрополярного упругого материала на процесс диффузии вблизи поверхности.

5. Разработаны подходы для описания локального увеличения концентрации диффундирующего вещества в деформируемом твердом теле с микроструктурой. Разработан подход для описания поверхностного эффекта при диффузии водорода в сталях, при котором практически весь водород аккумулируется в тонком слое порядка характерного размера структурной неоднородности материала.

Достоверность полученных результатов обеспечивается корректностью постановки задач и выбора методов исследования, строгостью применяемого математического аппарата, выполнимостью предельных переходов к известным решениям, адекватностью физическим представлениям о фактически наблюдаемых явлениях, а также качественным и количественным соответствием экспериментальным данным.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на ежегодных международных летних школах-конференциях «Advanced Problems in Mechanics» (г. Санкт-Петербург, 2019 – 2021 гг.); ежегодных научно-практических конференциях с международным участием «Неделя науки СПбГПУ» (г. Санкт-Петербург, 2018 г., 2019 г.); ежегодных международных конференциях «Corrosion In The Oil&Gas Industry» (г. Санкт-Петербург, 2019 г., 2021 г.); XXII Зимней школе по механике сплошных сред (г. Пермь, 2021 г.); XV Всероссийской школе «Математическое моделирование и биомеханика в современном университете» (пос. Дивноморское, 2021 г.); семинаре кафедры вычислительных методов механики деформируемого тела СПбГУ (руководитель семинара – д.ф.-м.н. Ю.Г. Пронина); семинарах кафедры механики сплошных сред и материаловедения ТУ Берлина (руководитель семинара – проф. В. Мюллер).

В полном объеме диссертационная работа докладывалась на городском семинаре по механике ИПМаш РАН (руководитель семинара – д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН Д.А. Индейцев); семинаре по прикладным задачам механики ИПМаш РАН (руководители семинара – д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН А.К. Беляев и д.т.н. В.А. Полянский); семинаре Высшей школы теоретической механики СПбПУ (руководитель семинара – д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН А.М. Кривцов).

Публикации по теме диссертации. Результаты диссертационного исследования опубликованы в 13 работах, в том числе в 3 работах в изданиях, рекомендованных ВАК РФ, и в 5 работах в изданиях, входящих в международные базы данных Scopus и Web of Science.

Личный вклад автора. Автором лично получено и проанализировано решение поставленных задач, реализованы проверки предельных переходов к известным случаям. Проведен обзор известных методик, на которых основывалось аналитическое и численное решение. Подготовлены материалы для публикаций.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 198 страницах и содержит 34 рисунка и 5 таблиц. Список литературы содержит 174 наименования.

Краткое содержание диссертации

Во введении обоснована актуальность и проведен анализ степени разработанности темы диссертации, сформулированы цель и задачи работы. Отмечена научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, дана ее общая характеристика.

В первой главе определяются эффективные свойства пористого материала с учетом сегрегации – скачка концентрации на границе раздела фаз. В главе используется и обобщается подход, предложенный И. Севостьяновым и М.Л. Качановым, в котором макроскопические свойства определяются в терминах тензоров вклада, отражающих совокупное влияние физических свойств композита и геометрии микроструктуры.

В разделе 1.1 изложена постановка задачи гомогенизации для определения эффективных диффузионных свойств трансверсально-изотропного на макроуровне пористого материала, анизотропия которого обусловлена формой и ориентацией неоднородностей (пор), при условии непрерывного потока через границу раздела матрица/неоднородность Γ и наличии скачка концентрации, являющегося частным случаем неидеального контакта:

$$D_0 \frac{\partial c(x)}{\partial n_\Gamma}(x) \Big|_{x \rightarrow \Gamma+} = D_1 \frac{\partial c(x)}{\partial n_\Gamma}(x) \Big|_{x \rightarrow \Gamma-}, \quad c(x)|_{x \rightarrow \Gamma+} = s c(x)|_{x \rightarrow \Gamma-}, \quad (1)$$

где D_0, D_1 – коэффициенты диффузии матрицы и неоднородности, c – концентрация, $\mathbf{n}_\Gamma$ – внешняя нормаль к Γ , s – параметр сегрегации ($s \leq 1$).

Эффективный тензор диффузии $\mathbf{D}^{eff}$ определяется исходя из предположения, что гомогенизированный материал, как и отдельные фазы композита, подчиняется линейному закону Фика, связывающему диффузионный поток и градиент концентрации:

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = -\mathbf{D}^{eff} \cdot \langle \nabla c \rangle_V, \quad (2)$$

где $\langle \cdot \rangle_V$ обозначает осреднение по репрезентативному объему V .

В разделе 1.2 определяется вклад изолированной сфероидальной неоднородности с неидеальным контактом в диффузионные свойства. Наличие скачка концентрации на границе раздела фаз учтено на этапах осреднения полей и определения тензора концентрации, связывающего поле внутри неоднородности с заданным на границе репрезентативного объема. Тензоры вклада сфероидальной неоднородности в диффузию $\mathbf{H}^D$ и в «сопротивляемость»

диффузии $\mathbf{H}^{DR}$ имеют вид:

$$\mathbf{H}^D = -D_0^2 \mathbf{H}^{DR} = D_0 \left[\frac{1 - s\alpha}{s\alpha + f_0(1 - s\alpha)} \tilde{\boldsymbol{\theta}} + \frac{1 - s\alpha}{1 - 2f_0(1 - s\alpha)} \mathbf{nn} \right], \quad (3)$$

где $\tilde{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{I} - \mathbf{nn}$ ($\mathbf{I}$ – единичный тензор второго ранга, $\mathbf{n}$ – орт оси симметрии сфероида), $\alpha = D_0/D_1$, $f_0 = f_0(\gamma)$ (γ – отношение длин полуосей сфероида, $\gamma < 1$ и $\gamma > 1$ соответствуют сплюснутым и вытянутым сфероидам).

В разделе 1.3 методы эффективного поля обобщаются для учета сегрегации при определении диффузионной проницаемости материала с множественными неоднородностями. При наличии преимущественной ориентации сфероидальных пор вдоль орта $\mathbf{m} = \mathbf{e}_3$, определяемой параметром разброса λ (λ изменяется в диапазоне от 0 до ∞ , что соответствует полностью произвольному и строго параллельному распределению неоднородностей по ориентациям), методы Мори-Танаки (М-Т), Канауна-Левина (К-Л), Максвелла и линеаризованный метод Максвелла обобщаются следующими формулами:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{eff} = D_0 & \left(1 + \frac{\phi a_H (1 - s\alpha)}{\phi a_H s\alpha + (1 - \phi)(1 - s\alpha)} \right) \boldsymbol{\theta} + \\ & + D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H (1 - s\alpha)}{\phi b_H s\alpha + (1 - \phi)(1 - s\alpha)} \right) \mathbf{mm}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\mathbf{D}^{eff} = D_0 \left(1 + \frac{\phi a_H}{1 - \phi a_H P_{\Lambda_{11}} D_0} \right) \boldsymbol{\theta} + D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H}{1 - \phi b_H P_{\Lambda_{33}} D_0} \right) \mathbf{mm}, \quad (5)$$

$$\mathbf{D}^{eff} = D_0 \left(1 + \frac{\phi a_H}{1 - \phi a_H P_{\Omega_{11}} D_0} \right) \boldsymbol{\theta} + D_0 \left(1 + \frac{\phi b_H}{1 - \phi b_H P_{\Omega_{33}} D_0} \right) \mathbf{mm}, \quad (6)$$

$$\mathbf{D}^{eff} \approx D_0 (1 + \phi a_H + \phi^2 a_H^2 D_0 P_{\Omega_{11}}) \boldsymbol{\theta} + D_0 (1 + \phi b_H + \phi^2 b_H^2 D_0 P_{\Omega_{33}}) \mathbf{mm}, \quad (7)$$

где $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{I} - \mathbf{mm}$, ϕ – объемная доля неоднородностей, $P_{\Lambda_{ii}}$ и $P_{\Omega_{ii}}$ ($i = 1, 3$) – компоненты тензоров Хилла фиктивных областей в схемах Канауна-Левина и Максвелла соответственно, $a_H = a_H(s, \gamma, \alpha, \lambda)$, $b_H = b_H(s, \gamma, \alpha, \lambda)$ являются компонентами осредненного по ориентациям неоднородностей тензора вклада, определенного в разделе 1.2.

В разделе 1.4 построены оценки эффективных коэффициентов диффузии в материале с произвольной микроструктурой (обобщенные границы Фойгта-Рейсса) и в изотропном на макроуровне материале (обобщенные границы Хашина-Штрикмана) с учетом сегрегации:

$$\frac{1}{\alpha s \phi + (1 - \phi)} \leq \frac{D^{eff}}{D_0} \leq (1 - \phi) + \frac{1}{\alpha s} \phi, \quad (8)$$

$$1 + \frac{3\phi(1 - \alpha s)}{(1 - \phi)(1 - \alpha s) + 3\alpha s} \leq \frac{D^{eff}}{D_0} \leq \frac{1}{\alpha s} + \frac{1}{\alpha s} \frac{3(1 - \phi)(\alpha s - 1)}{\phi(\alpha s - 1) + 3}. \quad (9)$$

В разделе 1.5 анализируется влияние микроструктурных параметров материала со сфероидальными порами, имеющими произвольную или преимущественную ориентацию, на эффективные коэффициенты диффузии. В случае сферических неоднородностей результаты, полученные с помощью обобщенных в работе методов эффективного поля, совпадают с нижней обобщенной границей Хашина-Штрикмана. В случае произвольно ориентированных сфероидальных пор, как показано на Рис. 1, только схема Мори-Танаки дает результат, находящийся между верхней и нижней оценками, в то время как другие схемы приводят к результатам, нарушающим одну из границ.

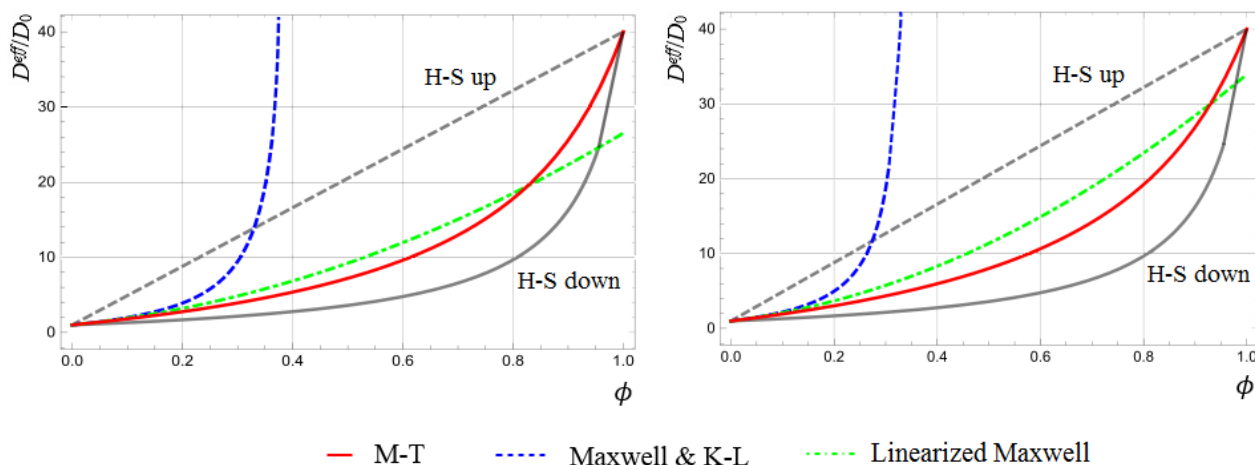


Рис. 1. Соответствие диффузионной проницаемости изотропного материала со сплюснутыми ($\gamma = 0.1$, слева) и вытянутыми ($\gamma = 10$, справа) сфероидальными порами обобщенным границам Хашина-Штрикмана; $s = 0.5$

Увеличение скачка концентрации в трансверсально-изотропном (и, в частности, изотропном) на макроуровне материале увеличивает эффективные коэффициенты диффузии. При этом сегрегация примеси внутри пор увеличивает «влияние формы» неоднородностей. На Рис. 2 представлены результаты, полученные с помощью обобщенной в работе схемы Мори-Танаки. Сегрегация усиливает влияние ориентации неоднородностей.

В разделе 1.6 результаты моделирования верифицированы путем проверки выполнимости предельных переходов, качественного соответствия физическим представлениям и сравнения с экспериментальными данными.

В разделе 1.7 определяются эффективные упругие свойства материала с несплошностями, возникающими при водородной деградации.

В разделе 1.8 установлены перекрестные соотношения между эффективными диффузионными и упругими свойствами. Показано, что наличие сегрегации накладывает ограничение на применимость данных соотношений.

Результаты первой главы опубликованы в работах [1–3, 5].

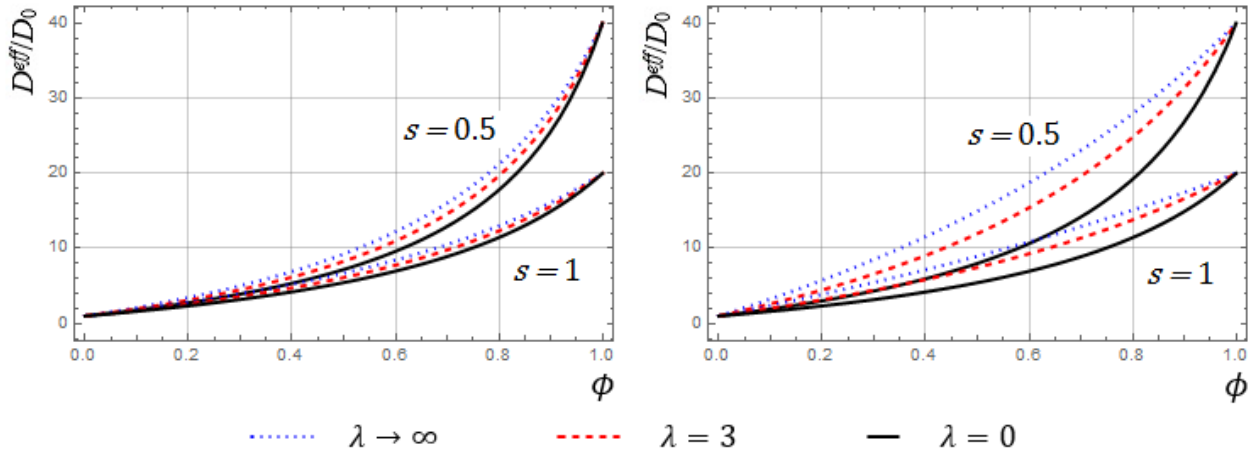


Рис. 2. Зависимости эффективного коэффициента диффузии от объемной доли сплюснутых ($\gamma = 0.1$, $D^{eff} = D_{11}^{eff} = D_{22}^{eff}$, слева) и вытянутых ($\gamma = 10$, $D^{eff} = D_{33}^{eff}$, справа) сфероидальных пор

Вторая глава посвящена моделированию поверхностного эффекта. В контексте проблемы массопереноса наличие дефектов вблизи поверхности может привести к существенно неравномерному распределению диффундирующего вещества. Значительное увеличение концентрации в поверхностном слое наблюдается при насыщении стальных изделий водородом. В главе предложена модель, описывающая формирование поверхностного слоя в ненасыщенном материале, что может впоследствии привести к неравномерному распределению примеси (данная проблема исследуется в третьей главе). Поверхностный эффект моделируется в рамках микрополярной теории, что позволяет учесть взаимодействие зерен/их фрагментов.

В разделе 2.1 приводятся основные уравнения микрополярной линейной теории упругости. Движение частиц среды описывается в общем случае независимыми векторами перемещений $\mathbf{u}$ и микроповорота $\boldsymbol{\theta}$. Вводятся тензоры силовых $\mathbf{T}$ и моментных $\mathbf{M}$ напряжений:

$$\mathbf{T} = \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \frac{G}{1 - N^2} \nabla \mathbf{u} + G \frac{1 - 2N^2}{1 - N^2} \mathbf{u} \nabla + 2G \frac{N^2}{1 - N^2} \mathbf{I} \times \boldsymbol{\theta}, \quad (10)$$

$$\mathbf{M} = 2Gl_t^2 \frac{1 - \psi}{\psi} (\nabla \cdot \boldsymbol{\theta}) \mathbf{I} + 4Gl_b^2 \nabla \boldsymbol{\theta} + 2G (l_t^2 - 2l_b^2) \boldsymbol{\theta} \nabla, \quad (11)$$

где λ и G – параметры Ламе, N – параметр асимметрии, ψ – полярный коэффициент, l_t и l_b – характерные длины для деформаций кручения и изгиба.

Уравнения равновесия в локальной форме имеют вид:

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_\times = 0. \quad (12)$$

В разделе 2.2 изложена постановка краевой задачи для длинного цилиндра радиуса r_0 . В цилиндрической системе координат (r, φ, z) решаются

задачи с двумя типами граничных условий, моделирующих реально наблюдаемые развороты и «выпучивание» зерен:

$$\boldsymbol{\theta}|_{r=r_0} = \boldsymbol{\theta}_0 = \theta_0 \mathbf{e}_\varphi \quad \text{или} \quad \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{M}|_{r=r_0} = \mathbf{M}_0 = M_0 \mathbf{e}_\varphi. \quad (13)$$

В разделе 2.3 получено аналитическое асимптотическое решение типа пограничного слоя. Предполагается, что решение краевой задачи зависит только от r . Для краткости здесь приводится решение, полученное при задании статического граничного условия:

$$u_z \approx -\frac{M_0}{2G} e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)}, \quad \theta_\varphi \approx \frac{M_0}{4GNl_b} e^{-\frac{N}{l_b}(r_0-r)}. \quad (14)$$

В разделе 2.4 предлагается основанный на сравнении теоретических и экспериментальных данных способ определения отношения l_b/N , характеризующего область убывания решения.

В разделе 2.5 разработан численный метод решения. Для обеспечения сохранения основных физических величин системы используется консервативная разностная аппроксимация дифференциальных уравнений.

В разделе 2.6 проанализировано решение задачи для стандартного образца, используемого в экспериментах по искусственному насыщению водородом. Перемещения, вызванные наличием на боковой поверхности распределенного момента, возникают в поверхностном слое толщиной 20–60 мкм, что соответствует экспериментальным данным о размерах насыщенной области.

В разделе 2.7 проведена оценка возможности инициации локализованной пластической деформации при одновременном растяжении цилиндра и задании распределенного момента на его боковой поверхности. Вводится либо единый обобщенный в литературе критерий Мизеса:

$$Y(\mathbf{T}, \mathbf{M}) \equiv \tilde{J}_2(\mathbf{T}, \mathbf{M}) - Y_p = 0, \quad (15)$$

$$\tilde{J}_2(\mathbf{T}, \mathbf{M}) = \sqrt{a_1 \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S}^T + a_2 \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S} + b_1 \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}^T + b_2 \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}}, \quad (16)$$

либо два независимых критерия:

$$Y_\sigma(\mathbf{T}) \equiv \tilde{J}_2(\mathbf{T}) - Y_p^T = 0, \quad Y_M(\mathbf{M}) \equiv \tilde{J}_2(\mathbf{M}) - Y_p^M = 0, \quad (17)$$

$$\tilde{J}_2(\mathbf{T}) = \sqrt{a_1 \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S}^T + a_2 \mathbf{S} \cdot \cdot \mathbf{S}}, \quad \tilde{J}_2(\mathbf{M}) = \sqrt{b_1 \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}^T + b_2 \mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{M}}, \quad (18)$$

где $\tilde{J}_2$ – интенсивность напряжений, $\mathbf{S} = \text{dev} \mathbf{T}$, a_1, a_2, b_1, b_2 – материальные параметры, Y_p , Y_p^T , Y_p^M – пределы текучести.

Показано, что при общем упругом поведении материала может наблюдаться локализованная пластическая деформация в приповерхностной области, размеры которой определяются значением характерной длины l_b .

Результаты второй главы опубликованы в работах [4, 6, 7, 9, 11].

Третья глава посвящена моделированию диффузии в твердом теле с учетом влияния неоднородной микроструктуры. В общем случае рассматриваются определяющие соотношения для диффузионного потока с учетом влияния полей напряжений и деформаций за счет введения либо зависимости коэффициента диффузии, либо инициируемого термодинамическими силами дополнительного потока. Основной акцент делается на оценку локального увеличения концентрации.

В разделе 3.1 описывается диффузия в пористом материале, эффективные свойства которого определены в первой главе. Проводится анализ влияния неоднородного распределения пор, характерного, в частности, для алюминия при наличии в нем водородных блистеров. Предполагается, что в результате неравномерного распределения примеси возникает дополнительный поток, инициированный градиентом давления ∇P , зависящим от эффективных модулей объемного сжатия K^{eff} и сдвига G^{eff} :

$$\mathbf{J} = -\mathbf{D}^{eff} \cdot (\nabla c + \bar{\beta}_c \nabla P), \quad (19)$$

где $\bar{\beta}$ – коэффициент переноса под действием напряжений.

При отсутствии дополнительного потока, вызванного градиентом давления, общий поток определяется классическим законом Фика.

На основании разработанных в диссертации численных методов решаются задачи диффузии и массоупругости (в рамках классической теории) для не несущего осевой нагрузки длинного цилиндра. На свободной от нагрузки боковой поверхности поддерживается постоянная концентрация c_0 .

На Рис. 3 показаны профили распределения диффундирующего вещества по радиусу цилиндра с произвольно ориентированными сфероидальными порами при $\phi = 0.1 \exp(-(r_0 - r)/r_0)$ и при использовании классического закона Фика. Увеличение скачка концентрации на границе матрица/пора (уменьшение s) приводит к увеличению локальной концентрации примеси через 50 часов насыщения. Наличие преимущественной ориентации пор оказывает большее влияние в случае вытянутых сфероидов, чем сплюснутых.

На Рис. 4 показаны концентрационные профили, построенные при учете вызванных накоплением примеси произвольно ориентированных микротрещин, моделируемых сплюснутыми сфероидальными порами с $\gamma = 0.1$, при $s = 0.1$. Для формального учета растрескивания рассматривается зависимость $\phi = 0.1c$, что приводит к увеличению локальной концентрации примеси. Необходимо учитывать вызванные определенной микроструктурой изменения и диффузионной проницаемости, и упругих модулей вместо рассмотрения характеристик матрицы D_0 и K_0, G_0 .

В разделе 3.2 описывается приповерхностная диффузия с учетом влияния напряженно-деформированного состояния материала, определяемого в

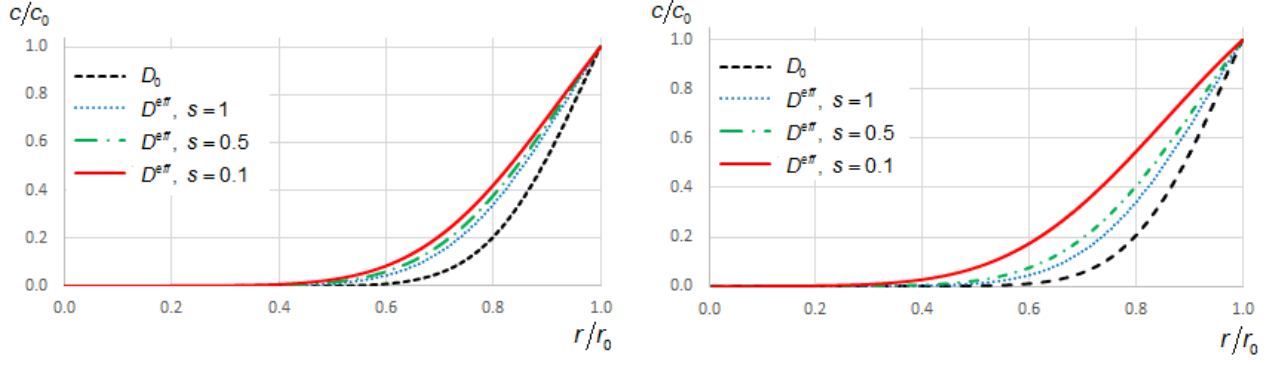


Рис. 3. Концентрационные профили через 50 часов насыщения материала с произвольно ориентированными сплюснутыми ($\gamma = 0.1$, слева) и вытянутыми ($\gamma = 10$, справа) сфероидальными порами

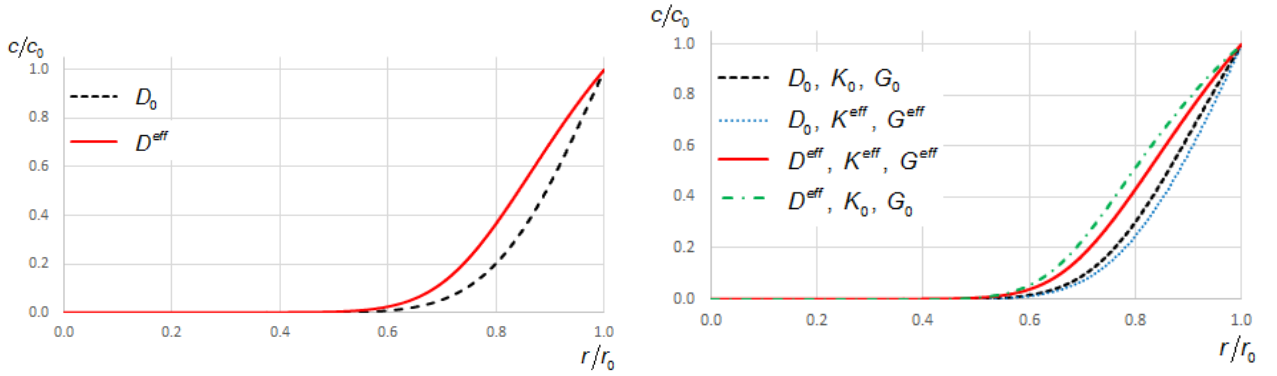


Рис. 4. Концентрационные профили через 50 часов насыщения при задании потока в соответствии с классическим законом Фика (слева) и с учетом бародиффузии (справа)

рамках микрополярной теории. Диффузионный поток выражается через градиент химического потенциала μ системы «диффундирующий идеальный газ – деформируемое твердое тело»:

$$\mathbf{J} = -Mc\nabla\mu = -Mc\nabla(\mu_G + \mu_S), \quad (20)$$

где $M = D_0/RT$ – подвижность диффундирующего вещества (R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура).

При $\mu_S = 0$ диффузионный поток определяется классическим законом Фика. Ч. Ву показал, что химический потенциал деформируемого твердого тела пропорционален следу тензора энергии-импульса Эшелби Σ :

$$\mu_S = \tilde{m}_S \left(f_S^0 + \frac{1}{\rho_S} \text{tr} \Sigma \right), \quad (21)$$

где $\tilde{m}_S$, ρ_S – молярная масса и плотность твердого тела, f_S^0 – плотность свободной энергии в ненапряженном состоянии.

Согласно работам М. Лазара, тензор энергии-импульса Эшелби линейного микрополярного материала определяется следующим образом:

$$\Sigma = W^{\text{micropolar}} \mathbf{I} - (\nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\varepsilon}^*) \cdot \mathbf{T}^T - (\nabla \boldsymbol{\theta}) \cdot \mathbf{M}^T, \quad (22)$$

где $W^{\text{micropolar}}$ – плотность энергии упругой деформации, $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ – тензор собственных деформаций.

Альтернативным способом учета влияния напряженно-деформированного состояния материала на диффузию является рассмотрение зависимости коэффициента диффузии от энергии упругой деформации, которая вводится в диссертации по аналогии с тем, как это делается в работах А.Г. Князевой и М.А. Миколайчука:

$$D = D_0 \exp \left(\frac{\tilde{m}_S + \tilde{m}_H}{\rho} \frac{W^{\text{micropolar}}}{RT} \right), \quad (23)$$

где $\tilde{m}_H$ – молярная масса газа.

Моделируется проведенный в работах В.А. Полянского и Ю.А. Яковлева эксперимент по искусственному насыщению стандартных цилиндрических образцов радиуса 4 мм водородом в течение 96 часов. На основании разработанных в диссертации численных методов в рамках микрополярной теории решается частично связанная задача массопругости для длинного цилиндра при задании на боковой поверхности распределенного момента в соответствии с условием (13) и поддержании на ней постоянной концентрации c_0 .

На Рис. 5 приведено сравнение концентрационных профилей, построенных при учете влияния напряженно-деформированного состояния через химический потенциал, определенный в рамках микрополярной и классической теории упругости, а также через зависимость коэффициента диффузии от плотности энергии упругой деформации микрополярной и классической среды. Результаты сравниваются с решением задачи диффузии при определении потока в соответствии с классическим законом Фика ($\mu_S = 0$, $D = D_0$). Учет влияния напряженно-деформированного состояния приводит к большей концентрации примеси в поверхностном слое, результаты удовлетворяют экспериментальным данным. Учет моментных взаимодействий между частицами среды усиливает эффект.

В разработанных моделях на процесс диффузии влияют два фактора: распределенный момент на боковой поверхности и накопление водорода в материале. Влияние распределенного момента показано на Рис. 6. Сравниваются результаты, полученные при одной и той же суммарной концентрации $m_H = 0.0075$ мг, равной экспериментальному значению. Вне зависимости от способа учета влияния напряженно-деформированного состояния на процесс диффузии увеличение M_0 приводит к увеличению локальной концентрации примеси в поверхностном слое порядка 20 мкм.

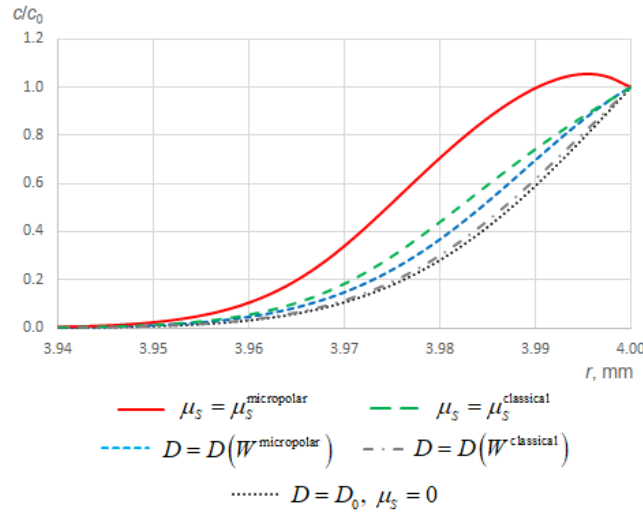


Рис. 5. Концентрационные профили через 96 часов насыщения

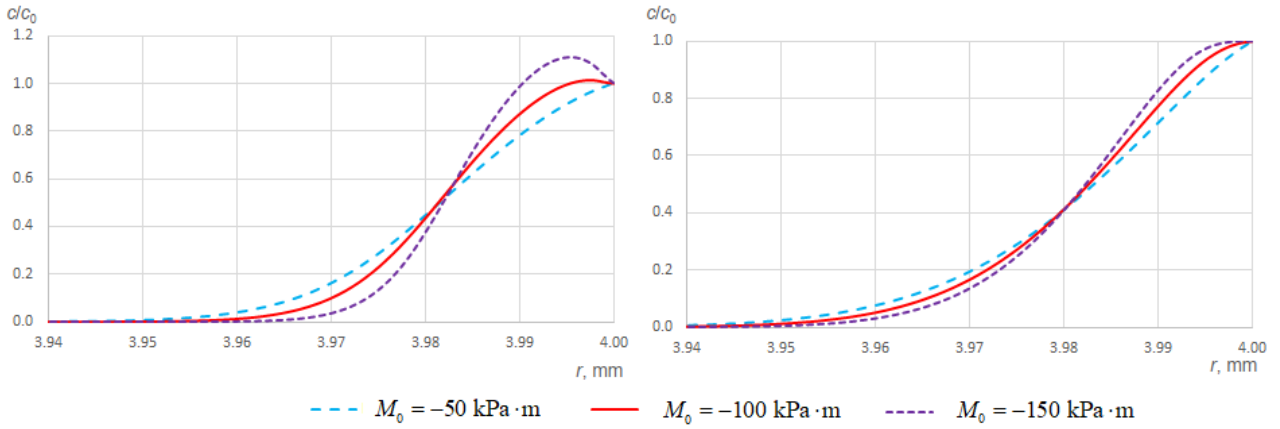


Рис. 6. Влияние распределенного момента на концентрационные профили при использовании моделей с $\mu_s^{\text{micropolar}}$ (слева) и $D(W^{\text{micropolar}})$ (справа); $m_H = 0.0075$ мг

При использовании модели с химическим потенциалом концентрация принимает максимальное значение на некотором расстоянии от поверхности. Обнаруженный эффект объясняется тем, что в задаче не рассматривается область вне цилиндра – в результате, водород не может диффундировать наружу под действием градиента концентрации и диффундирует в «перенасыщенную» область, характеризующуюся, тем не менее, меньшими напряжениями. При этом полученный результат соответствует наблюдаемому экспериментально наличию образованных в результате накопления водорода микротрещин вблизи поверхности на некотором удалении от нее, приводящих к появлению водородных блистеров.

Результаты третьей главы опубликованы в работах [4, 6, 8, 10, 12, 13].

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Основные результаты

1. Методы гомогенизации обобщены для учета сегрегации при определении эффективной диффузионной проницаемости композита, состоящего из изотропной матрицы и изотропных неоднородностей с заданным распределением по ориентациям.
2. Определены эффективные диффузионные свойства трансверсально-изотропного пористого материала, анизотропия которого обусловлена геометрией микроструктуры, с учетом эффекта сегрегации.
3. Для описания связанных со структурными особенностями материала поверхностных эффектов различной природы предложен подход, основанный на определении напряженно-деформированного состояния в рамках микрополярной теории упругости. Поведение поверхностного слоя описано на примере длинного цилиндра.
4. Разработаны модели диффузии с учетом влияния неоднородной микроструктуры деформируемого твердого тела в рамках микромеханики и в рамках микрополярной теории. Проведен анализ влияния неоднородной микроструктуры на распределение диффундирующего вещества, позволяющий описать локальное увеличение концентрации.
5. Разработаны численные методы для решения нелинейных связанных задач об определении напряженно-деформированного состояния длинного цилиндра и распределения диффундирующего вещества с учетом микроструктуры в рамках микромеханики и микрополярной теории.
6. Разработан подход для описания поверхностного эффекта при диффузии водорода, основанный на учете взаимодействия зерен посредством моментных взаимодействий между частицами микрополярной среды.

Публикации по материалам диссертации

В изданиях, рекомендованных ВАК РФ

1. Фролова К.П. Соотношения между модулем Юнга и коэффициентом диффузии двухфазного материала // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. – 2021. – Т. 14. – № 1. – С. 177–189.
2. Frolova K.P., Vilchevskaya E.N. Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores // Materials Physics & Mechanics. – 2021. – Т. 47. – № 6. – С. 937–950.
3. Фролова К.П. Определение эффективного модуля Юнга среды с микроструктурой, характерной для водородной деградации // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного поли-

технического университета. Физико-математические науки. – 2020. – Т. 13. – № 2. – С. 160–174.

В изданиях, входящих в базы данных Scopus/Web of Science

4. Frolova K., Vilchevskaya E., Bessonov N., Müller W., Polyanskiy V., Yakovlev Y. Application of micropolar theory to the description of the skin effect due to hydrogen saturation // Mathematics and Mechanics of Solids. – 2021. DOI: 10.1177/10812865211059223
5. Frolova K.P., Vilchevskaya E.N. Effective Diffusion Coefficient of a Porous Material Applied to the Problem of Hydrogen Damage // Advances in Hydrogen Embrittlement Study. – Springer, Cham, 2021. – С. 113–130.
6. Frolova K.P., Vilchevskaya E.N., Polyanskiy V.A., Yakovlev Y.A. Modeling the skin effect associated with hydrogen accumulation by means of the micropolar continuum // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2021. – Т. 33. – № 3. – С. 697–711.
7. Frolova K., Vilchevskaya E., Polyanskiy V., Alekseeva E. Modelling of a hydrogen saturated layer within the micropolar approach // New Achievements in Continuum Mechanics and Thermodynamics. – Springer, Cham, 2019. – С. 117–128.
8. Polyanskiy A.M., Polyanskiy V.A., Frolova K.P., Yakovlev Y.A. Vacuum vs argon technology for hydrogen measurement // Procedia Structural Integrity. – 2018. – Т. 13. – С. 1408–1413.

В изданиях, входящих в базу данных РИНЦ

9. Фролова К.П., Вильчевская Е.Н. Сравнение условий пластичности для микрополярных сред на примере модели цилиндрического образца // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. – 2019. – № 5. – С. 6–22.
10. Яковлев Ю.А., Третьяков Д.А., Фролова К.П. Водородная диагностика элементов конструкций и инженерных конструкций // Мехатроника, автоматика и робототехника. – 2019. – № 3. – С. 117–120.
11. Фролова К.П., Вильчевская Е.Н., Полянский В.А. Моделирование наводороженного поверхностного слоя в рамках теории микрополярных сред // Неделя науки СПбПУ. – 2018. – С. 85–88.
12. Алексеева Е.Л., Беляев А.К., Зегжда А.С., Полянский А.М., Полянский В.А., Фролова К.П., Яковлев Ю.А. Влияние пограничного слоя на распределение концентраций водорода при испытаниях сталей на стойкость к водородному растрескиванию // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. – 2018. – № 3. – С. 43–57.
13. Полянский А.М., Полянский В.А., Фролова К.П., Яковлев Ю.А. Водородная диагностика металлов и сплавов // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. – 2018. – № 6. – С. 37–50.