

Дискретно-континуальный подход к моделированию поведения многослойных систем при высокотемпературном воздействии. Метод возбудимых клеточных автоматов

В. Е. Панин, Г. Ш. Бикинцев, Д. Д. Моисеенко, П. В. Максимов
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
пр. Академический, 2/4, 634021, Томск, Россия,
bgs@ispms.tsc.ru

Аннотация

На основе трехмерной модели возбудимых клеточных автоматов (Stochastic Excitable Cellular Automata – SECA) решается задача повышения надежности и увеличения срока службы многослойного термобарьерного покрытия в сопле реактивного двигателя. Проведены численные эксперименты, нацеленные на изучение специфики распространения теплового фронта в композитах, состоящих из медной подложки и керамического покрытия различного профиля с введением в интерфейс дополнительного промежуточного слоя. Обнаружено, что интерфейс зубчатой геометрии задерживает развитие деформации медного подслоя. Вскрыта причина положительного эффекта «зубчатости» интерфейса. Показано, что общепринятый подход к оценке несущей способности покрытий на основе их адгезии к подложке является очень ограниченным. Сделан вывод о необходимости создания и развития гибридных многоуровневых моделей поведения гетерогенных систем, работающих в условиях экстремальных внешних воздействий.

1. Введение

Исследование поведения термобарьерных многослойных покрытий является крайне актуальной задачей в свете создания ракетной техники и реактивных самолетов нового поколения. В особенности это относится к материалам, применяемым при изготовлении таких деталей, как сопла реактивных двигателей. Несмотря на то, что сопло реактивного двигателя является последней его ступенью, оно играет далеко не последнюю роль. Современное сопло является сложным аэродинамическим элементом, создающим направленную струю газа для придания летательному аппарату соответствующего ускорения. В реальности конструирование сопел является целой областью науки, и перед учеными стоит важная проблема: как создать тугоплавкие детали из плавящихся металлов. Данная проблема чрезвычайно сложна, является комплексной и решается по сей день. Известно, что экспериментальные исследования материалов и последующие натурные испытания готовых конструкций весьма трудоемки и дорогостоящи. В связи с этим теоретическое прогнозирование на базе компьютерного эксперимента является весьма актуальным. Высокие требования, предъявляемые к новым материалам, диктуют необходимость создания и развития новых современных методов компьютерного моделирования поведения сред со структурой в экстремальных условиях нагружения.

Твердое тело как многоуровневая иерархическая система в процессе экстремальных внешних воздействий (механических, тепловых, радиационных, и пр.) на каждом масштабном уровне претерпевает структурно-фазовые превращения, происходящие в результате действия потоков различной природы. Проблема построения адекватной математической модели процесса переноса, которая учитывает иерархию масштабных уровней в структурно-фазовых превращениях, – наиболее важная и актуальная задача теории твердого тела. Долгое время не удавалось органически связать механику сплошных сред и термодинамику на макроуровне с дислокационными теориями, пытающимися описать кривую течения на микроуровне.

Однако более двадцати лет назад зародилось новое научное направление – физическая мезомеханика деформируемого твердого тела, основанная на концепции структурных уровней деформации твердых тел и позволяющая связать между собой микро- и макромасштабные подходы [1-2]. В рамках данного направления деформация нагруженного твердого тела рассматривается как многоуровневый процесс, связанный с потерей сдвиговой устойчивости на разных масштабных уровнях. В многоуровневой самоорганизации структурно-фазовых превращений принципиально важную роль играют все типы интерфейсов в нагруженном твёрдом теле, на которых возникает

«шахматное» распределение растягивающих и сжимающих нормальных и касательных напряжений.

Как правило, существующие на данный момент методы механики сплошных сред учитывают наличие внутренней структуры путем задания так называемой «нелинейности свойств», т.е. пространственного разброса параметров моделируемой среды [3]. Однако при решении задач физической мезомеханики требуется не только явно учитывать внутреннюю структуру материала путем задания различных свойств у отдельных элементов (как это традиционно делается в численных методах механики сплошных сред), но и учитывать иерархический характер взаимодействия между различными структурными элементами.

Для моделирования поведения материалов со сложной структурой, имеющей тенденцию к перестроению, наряду с классическими методами сплошных сред необходимо привлекать класс методов, позволяющих в явном виде задавать как структуру моделируемой среды, так и законы взаимодействия между структурными элементами. Это – так называемые дискретные подходы. Наиболее известными дискретными методами являются методы молекулярной динамики и клеточных автоматов.

Метод клеточных автоматов, изначально разработанный для моделирования передачи импульсов головного мозга, за последние полвека существенно расширил область своих применений [4-9]. Клеточные автоматы – это сети из активных элементов, меняющих свое состояние в дискретные моменты времени по определенному набору правил в зависимости от того, какими были состояния самого элемента и его ближайших соседей по сети в предыдущий дискретный момент времени.

В данной работе моделирование переноса тепловой энергии и связанных с ним деформационных процессов осуществляется на базе специальной модификации метода стохастических возбудимых клеточных автоматов (Stochastic Excitable Cellular Automata – SECA). Возбудимый автомат способен совершать последовательную цепочку переключений состояний под влиянием внешнего воздействия. Каждый такой автомат характеризуется определенным набором соседей на первой координационной сфере, а также числовыми параметрами, соответствующими материалу, содержащемуся в моделируемом объеме пространства, такими как модуль упругости, плотность, модуль сдвига, плотность дислокаций, удельная теплопроводность, удельная теплоёмкость, коэффициент температурного расширения и др. При взаимодействии с соседними автоматами могут меняться тепловая и механическая составляющие энергии, а значит, и связанные с ними физические параметры (температура, энтропия, напряжение, деформация, плотность и т.д.).

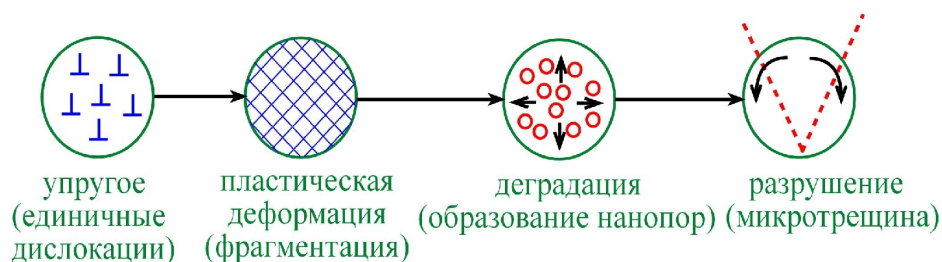


Рисунок 1. Переход клеточного состояния из одного состояния в другое.

Теплоперенос моделируется согласно гипотезе Фурье, где количество теплоты dQ , проходящее через элемент изотермической поверхности dF за промежуток времени dx , прямо пропорционально градиенту температуры, т. е.

$$\frac{dQ}{dFdt} = J_T = \lambda \text{grad}(t)$$

Здесь J_T – плотность теплового потока, определяемая как количество теплоты, проходящее в единицу времени через единицу площади изотермической поверхности; λ – коэффициент теплопроводности. Причины, вызывающие поток J_i , т. е. градиенты

температуры, градиенты концентрации, внешние силы и т.д., принято называть обобщенными силами и обозначать X_i .

Для определения температур клеточных автоматов на нулевом шаге численного эксперимента для каждого из них задаются начальные значения температуры T^0 , деформации ε^0 , верхнее пороговое значение деформации ε_s , а также величины теплопроводности λ , теплоемкости c и коэффициента линейного термического расширения α . Затем на каждом n -м временном шаге вычисляется новое значение температуры автомата с учетом тепловых потоков со стороны каждого соседнего автомата:

$$T_i^n = T_i^{n-1} + \frac{1}{c_i} \cdot \sum_{k=1}^N Q_{ik}^n, \quad (1)$$

где T_i^n , T_i^{n-1} – температуры i -го клеточного автомата на n -м и $(n-1)$ -м шагах по времени, c_i – теплоёмкость i -го автомата, Q_{ik}^n – поток тепловой энергии из соседнего клеточного автомата с индексом k в рассматриваемый автомат с индексом i на n -м шаге по времени, N – число соседей.

Изменение тепловой энергии Q_{ik}^n вычисляется на основе закона Фурье:

$$Q_{ik}^n = \frac{\lambda_{ik} \cdot \Omega}{l} \cdot (T_k^{n-1} - T_i^{n-1}) \cdot \Delta \tau, \quad (2)$$

где λ_{ik} – коэффициент взаимной теплопроводности, l – расстояние между центрами рассматриваемых автоматов, Ω – площадь смежной грани, $\Delta \tau$ – величина временного шага.

Известно, что в металлах теплопроводность определяется движением электронного газа, в то время как диэлектрики переносят тепло в основном посредством фононов (колебаний кристаллической решетки). На границе двух зерен скорость переноса фононов убывает в связи с разными углами ориентации решеток зерен. В то же время на скорость свободных электронов (электронного газа) угол разориентации зерен никак не влияет. Для учета доли влияния фононов и свободных электронов на перенос тепла на границе раздела предлагается следующее соотношение:

$$\lambda_j = \tilde{\lambda}_j e^{-\phi_j \theta_{ik}}, \quad (3)$$

где $\tilde{\lambda}_j$ – коэффициент теплопроводности j -го автомата (из таблицы для правильных металлов), ϕ_j – коэффициент, определяющий долю влияния фононов на теплопроводность материала, θ_{ik} – угол (в градусах), определяемый различием ориентаций кристаллических решёток i -го и k -го автоматов.

После того как с помощью формулы (1) были получены новые значения температуры T_i^n , для каждого i -го автомата вычисляются следующие величины:

1. изменение деформации вследствие теплового расширения:

$$\Delta_{\mathcal{Q}} \varepsilon_i^n = \alpha_i \cdot (T_i^n - T_i^{n-1}), \quad (4)$$

где $\Delta_{\mathcal{Q}} \varepsilon_i^n$ – локальная деформация, возникшая из-за термического расширения (сжатия), α_i – коэффициент термического расширения i -го автомата, T_i^n, T_i^{n-1} – значения температур i -го автомата на n -м и $(n-1)$ -м шагах по времени;

2. соответствующие изменения напряжения, вычисляемые по формуле Гука ($\sigma = \varepsilon Y$):

$$\Delta_{\mathcal{Q}} \sigma_i^n = \alpha_i \cdot (T_i^n - T_i^{n-1}) \cdot Y_i^n, \quad (5)$$

где Y_i^n – модуль Юнга;

3. соответствующие изменения механической энергии A_i^n вследствие перехода части тепловой энергии в механическую:

$$\Delta_Q A_i^n = \int_{\varepsilon_i^{n-1}}^{\varepsilon_i^{n-1} + \Delta_Q \varepsilon_i^n} \sigma_i^n d\varepsilon = Y_i^n \int_{\varepsilon_i^{n-1}}^{\varepsilon_i^{n-1} + \Delta_Q \varepsilon_i^n} \varepsilon d\varepsilon =$$

$$= \frac{Y_i^n \cdot V_{CA}}{2} \cdot \left(\text{sign}(\varepsilon_i^{n-1} + \Delta_Q \varepsilon_i^n) \cdot (\varepsilon_i^{n-1} + \Delta_Q \varepsilon_i^n)^2 - \text{sign}(\varepsilon_i^{n-1}) \cdot (\varepsilon_i^{n-1})^2 \right), \quad (6)$$

где $\varepsilon_i^{n-1}, \Delta_Q \varepsilon_i^n$ – деформации клеточного автомата, σ_i^n – напряжение клеточного автомата, Y_i^n – модуль Юнга, V_{CA} – объем клеточного автомата;

4. новое значение тепловой энергии Q_i^n :

$$Q_i^n = Q_i^{n-1} + c_i \cdot (T_i^n - T_i^{n-1}) - \Delta_Q A_i^n; \quad (7)$$

5. в соответствии с соотношением (7), вносится поправка в новое значение температуры:

$$T_i^n = T_i^{n-1} - \frac{\Delta_Q A_i^n}{c_i}. \quad (8)$$

2. Результаты моделирования

Во всех численных экспериментах моделировались образцы с размерами $50 \times 50 \times 30$ мкм. В начальный момент времени температура каждого автомата равнялась 300 К. Граничные условия задавались следующим образом: верхняя грань образца нагрета до 1000 К, нижняя – до 300 К. Величина временного шага равнялась 10^{-10} с, размер клеточного автомата – 1 мкм. Общий вид образца, представленного в виде трехмерной сети возбудимых клеточных автоматов, и схема его нагружения представлены на рис.2.

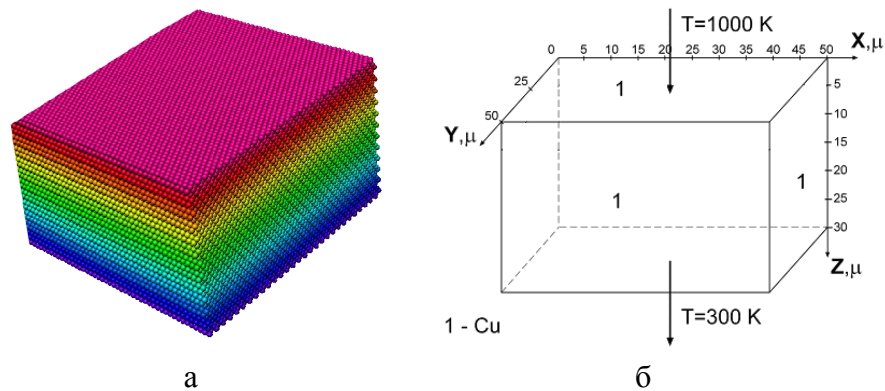


Рисунок 2. Общий вид (а) и схема нагружения (б) моделируемого образца.

Были проведены численные эксперименты по распространению теплового фронта в композитах, состоящих из медной подложки, керамического покрытия и дополнительного промежуточного слоя, обладающих различными типами внутренней геометрии.

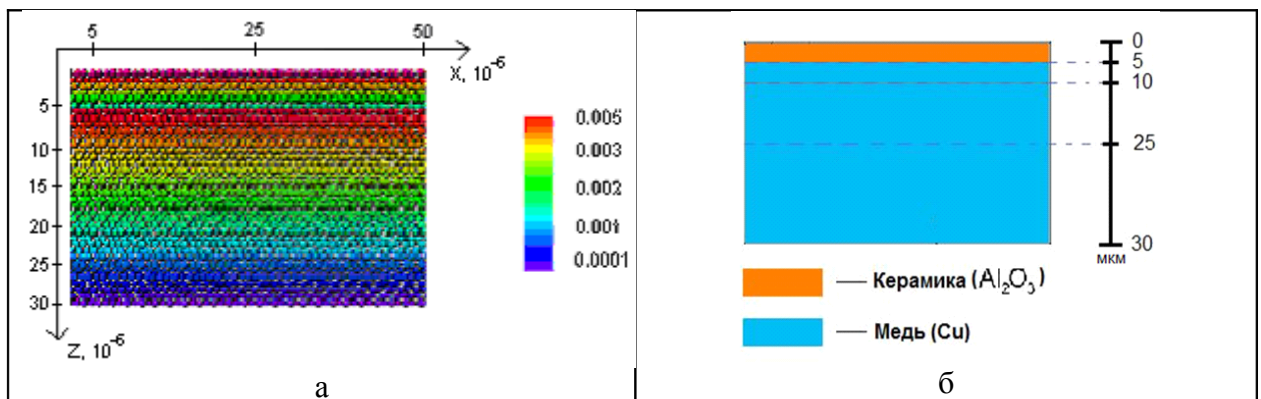


Рисунок 3. Распределение объемной деформации в плоскости «у = 25мкм» образца из меди с керамическим покрытием (а) и его схематическая структура (б).

Было обнаружено, что при наличии границы раздела происходит накопление больших градиентов напряжения около данной границы, способствующих отслоению керамического покрытия в будущем.

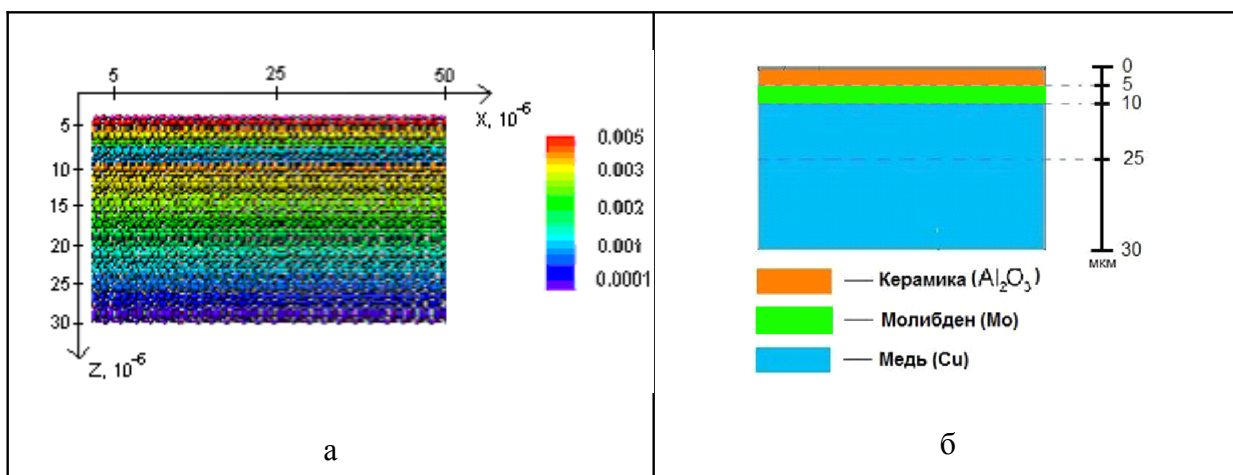


Рисунок 4. Распределение объемной деформации в плоскости « $y = 25\text{мкм}$ » образца из меди с керамическим покрытием и промежуточным молибденовым подслоем (а) и его схематическая структура (б).

Чередование молибдена и корунда резко уменьшило развитие деформации в приграничном слое меди, что является положительным результатом. Промежуточный слой пластичного молибдена снижает растягивающие нормальные напряжения на интерфейсе « $\text{Cu} - \text{Al}_2\text{O}_3$ ». Такое уменьшение напряжений, в свою очередь, задерживает растрескивание и локальное отслоение теплозащитного покрытия Al_2O_3 и позволяет повысить температуру теплового удара.

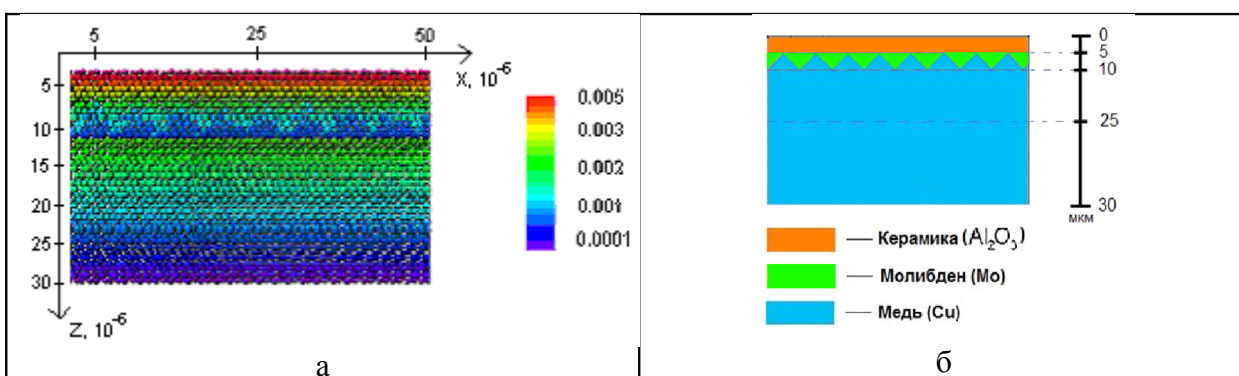


Рисунок 5. Распределение объемной деформации в плоскости « $y = 25\text{мкм}$ » образца из меди с керамическим покрытием и промежуточным подслоем, который представляет собой чередующиеся в шахматном порядке островки молибдена и меди в виде зубцов (а) и его схематическая структура (б).

Результаты показывают, что зубчатая форма границы раздела положительно влияет на распределение напряжений. Причиной положительного эффекта зубчатости является тот факт, что нормальная составляющая σ_n , действующая на покрытие с зубчатой границей раздела, меньше, чем в случае плоской границы, а касательные напряжения σ_t от граней АВ и ВС, взаимоуничтожаются; этот механизм схематически представлен на рис. 6.

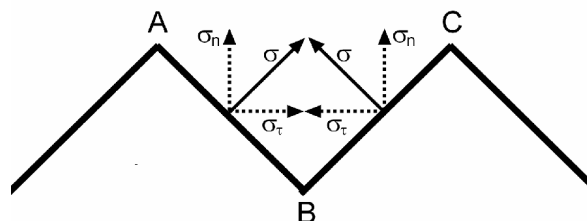


Рисунок 6. Механизм взаимоуничтожения касательных напряжений и уменьшения величины напряжений, нормальных к макроинтерфейсу.

Вследствие этого на границе раздела накапливаются градиенты напряжений, меньшие по сравнению с градиентами напряжений, соответствующими рисунку 4. Молибденовый подслой, в свою очередь, замедляет распределение теплового фронта, что обеспечивает малую вероятность отслоения покрытия.

3. Заключение

В результате проведенного анализа можно сделать вывод о том, что сочетание двух благоприятных факторов, таких как зубчатость и молибденовый подслоя, дало наибольшую эффективность теплозащитного покрытия, т.е. последняя композиция оказалась наиболее выгодной для снижения внутренних термических напряжений.

Таким образом, исследован характер влияния теплового фронта на картину распределения внутренних термических напряжений и связанных с ними объемных деформаций, возникающих вследствие теплового расширения. Также исследовано влияние внутренней границы раздела, наличие дополнительного слоя и влияние геометрической формы внутренней границы раздела на процесс распространения теплового фронта.

Путем проведения серии численных экспериментов на базе SECA метода удалось сформулировать рекомендации по улучшению эксплуатационных характеристик композитов с термобарьерными покрытиями. В дальнейшем планируется провести более детальное моделирование чередования молибдена и корунда, направленное на оптимизацию длин и толщин молибденовых «пластин», их профиля и других характеристик.

Литература

1. Physical mesomechanics and computer-aided design of materials: In 2 vol. / Ed. by V.E. Panin, Nauka, Novosibirsk, 1995. Vol. 1. – 298 pp., Vol. 2. – 320 pp. (in Russian).
2. Physical mesomechanics of Heterogeneous Media and Computer-aided Design of Materials / Ed. by V.E. Panin. – Cambridge: Cambridge Interscience Publishing, 1998.
3. Романова В.А., Балохонов Р.Р. О роли внутренних границ раздела в процессах формирования мезоскопического деформационного рельефа на свободной поверхности нагруженных металлов // Физ. мезомех. – 2010. – Т. 13. – № 4. – С. 35–44.
4. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. – М.: Наука, 1990. – 272 с.
5. S. Wolfram // Nature. 1984. V. 311. P. 419-424.
6. Л.С. Полак, А.С. Михайлов. Самоорганизация в неравновесных физико-химических системах. – М.: Наука, 1983. 286 с.
7. Н. Винер, А. Розенблют // Кибернетический сборник, вып. 3, М.: ИЛ, 1961. С. 3-56.
8. J. Kroc. Application of Cellular Automata Simulations to Modelling of Dynamic Recrystallization // Lecture Notes in Computer Science. 2329 (2002), P. 773-782.
9. A. Godara, D. Raabe. Mesoscale simulation of the kinetics and topology of spherulite growth during crystallization of isotactic polypropylene (iPP) by using a cellular automaton // Modelling Simulation Materials Science Engineering. 13 (2005), P. 733-751.