

**DREAM**

<http://dream-journal.org>

ISSN 2410-9908

DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4

---

---

**Diagnostics, Resource and Mechanics**  
*of materials and structures*

---

---

<http://dream-journal.org>

**4**  
**2024**  

---

**July-August**

Editor-in-Chief: **Sergey V. Smirnov**  
Deputy Editors-in-Chief: **Sergey V. Gladkovsky**  
Deputy Editors-in-Chief: **Evgenii Yu. Prosviryakov**

## Editorial Council

**Anatoly A. Burenin** (Russia)  
**Irina G. Goryacheva** (Russia)  
**Janez Grum** (Slovenia)  
**Mikhail P. Lebedev** (Russia)  
**Leopold I. Leontiev** (Russia)  
**Evgeny V. Lomakin** (Russia)  
**Valery P. Matveenko** (Russia)  
**Nikolay A. Makhutov** (Russia)  
**Nikita F. Morozov** (Russia)  
**Vladimir V. Moskvichev** (Russia)  
**Sergey V. Panin** (Russia)  
**Vasily M. Fomin** (Russia)  
**Shao Wen-zhu** (China)

## Editorial Board

**Boris V. Artemyev** (Moscow)  
**Vladimir A. Bataev** (Novosibirsk)  
**Ivan A. Bataev** (Novosibirsk)  
**Aleksandr K. Belyaev** (St.-Peterburg)  
**Sergey V. Burov** (Ekaterinburg)  
**Vladimir O. Vaskovsky** (Ekaterinburg)  
**Dmitry I. Vichuzhanin** (Ekaterinburg)  
**Vladimir G. Degtyar** (Miass)  
**Igor G. Emelyanov** (Ekaterinburg)  
**Sergey M. Zadvorkin** (Ekaterinburg)  
**Alexander G. Zalazinsky** (Ekaterinburg)  
**Yuliya V. Khudorozhkova** (Ekaterinburg)  
**Anatoly V. Kononov** (Ekaterinburg)  
**Vladimir N. Kostin** (Ekaterinburg)  
**Tatyana P. Lyubimova** (Perm)  
**Aleksey V. Makarov** (Ekaterinburg)  
**Vladimir A. Mironov** (Ekaterinburg)  
**Radik R. Mulyukov** (Ufa)  
**Vitaly V. Muravyov** (Izhevsk)  
**Aleksandr P. Nichipuruk** (Ekaterinburg)  
**Oleg A. Plekhov** (Perm)  
**Anna M. Povlotskaya** (Ekaterinburg)  
**Artemiy A. Popov** (Ekaterinburg)  
**Nataliya B. Pugacheva** (Ekaterinburg)  
**Igor Yu. Pyshmintsev** (Chelyabinsk)  
**Evgeniy Yu. Raskatov** (Ekaterinburg)  
**Anatoly B. Rinkevich** (Ekaterinburg)  
**Roman A. Savray** (Ekaterinburg)  
**Alexander S. Smirnov** (Ekaterinburg)  
**Vladimir P. Shveikin** (Ekaterinburg)  
**Alexander I. Ulyanov** (Izhevsk)

**Eelena E. Verstakova**, editor of the English translation  
**Olga A. Verstakova**, editor of Russian texts  
**Anna V. Garieva**, maker-up  
**Galina V. Torlopova**, associate editor  
**Raul N. Shakirov**, site admin

Postal address: Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 34 Komsomolskaya st., 620049,  
Ekaterinburg, Russian Federation  
phone: +7 (343) 375-35-83,  
fax: +7 (343) 374-53-30  
e-mail: [dream-journal@mail.ru](mailto:dream-journal@mail.ru)  
<http://dream-journal.org>

**Главный редактор: Смирнов Сергей Витальевич, д.т.н.**

**Заместитель главного редактора: Сергей Викторович Гладковский, д.т.н.**

**Заместитель главного редактора: Евгений Юрьевич Просвиряков, д.ф.-м.н.**

Редакционный совет:

**Буренин Анатолий Александрович**, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)  
**Горячева Ирина Георгиевна**, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)  
**Грум Янез**, Ph.D, (Республика Словения)  
**Лебедев Михаил Петрович**, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)  
**Леонтьев Леопольд Игоревич**, академик РАН, д.т.н. (Россия)  
**Ломакин Евгений Викторович**, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Россия)  
**Матвеев Валерий Павлович**, академик РАН, д.т.н. (Россия)  
**Махутов Николай Андреевич**, член-корр. РАН, д.т.н. (Россия)  
**Морозов Никита Федорович**, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)  
**Москвичев Владимир Викторович**, д.т.н. (Россия)  
**Панин Сергей Викторович**, д.т.н. (Россия)  
**Фомин Василий Михайлович**, академик РАН, д.ф.-м.н. (Россия)  
**Шао Вэнь-чжу**, профессор (Китай)

Редакционная коллегия:

**Артемьев Борис Викторович**, д.т.н., (Москва)  
**Батаев Владимир Андреевич**, д.т.н. (Новосибирск)  
**Батаев Иван Анатольевич**, д.т.н. (Новосибирск)  
**Беляев Александр Константинович**, член-корр. РАН, д.ф.-м.н., (Санкт-Петербург)  
**Буров Сергей Владимирович**, к.т.н. (Екатеринбург)  
**Васьковский Владимир Олегович**, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)  
**Вичужанин Дмитрий Иванович**, к.т.н. (Екатеринбург)  
**Дегтярь Владимир Григорьевич**, академик РАН, д.т.н. (Миасс)  
**Емельянов Игорь Георгиевич**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Задворкин Сергей Михайлович**, к.ф.-м.н. (Екатеринбург)  
**Залазинский Александр Георгиевич**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Коновалов Анатолий Владимирович**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Костин Владимир Николаевич**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Любимова Татьяна Петровна**, д.ф.-м.н. (Пермь)  
**Макаров Алексей Викторович**, член-корр. РАН, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Мионов Владимир Александрович**, д.м.н. (Екатеринбург)  
**Мулюков Радик Рафикович**, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Уфа)  
**Муравьев Виталий Васильевич**, д.т.н. (Ижевск)  
**Ничипурук Александр Петрович**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Плехов Олег Анатольевич**, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Пермь)  
**Поволоцкая Анна Моисеевна**, к.т.н. (Екатеринбург)  
**Попов Артемий Александрович**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Пугачева Наталия Борисовна**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Пышминцев Игорь Юрьевич**, д.т.н. (Челябинск)  
**Раскатов Евгений Юрьевич**, д.т.н. (Екатеринбург)  
**Ринкевич Анатолий Брониславович**, член-корр. РАН, д.ф.-м.н. (Екатеринбург)  
**Саврай Роман Анатольевич**, к.т.н. (Екатеринбург)  
**Смирнов Александр Сергеевич**, к.т.н. (Екатеринбург)  
**Ульянов Александр Иванович**, д.т.н. (Ижевск)  
**Худорожкова Юлия Викторовна**, к.т.н. (Екатеринбург)  
**Швейкин Владимир Павлович**, д.т.н. (Екатеринбург)

**Верстакова Елена Евгеньевна** – редактор перевода текста на английский язык

**Верстакова Ольга Андреевна** – редактор текста

**Гариева Анна Валерьевна** – верстальщик текста

**Торлопова Галина Викторовна** – помощник редактора

**Шакиров Рауль Нурович**, к.т.н. – администратор сайта журнала

Адрес редакции:

Россия, 620049, г. Екатеринбург, ул. Комсомольская, д. 34., ИМАШ УрО РАН

телефон: +7 (343) 375 35 83, факс +7 (343) 374-53-30

e-mail: dream-journal@mail.ru

<http://dream-journal.org>

## CONTENTS

<b>Vichuzhanin D. I., Smirnov S. V., Pugacheva N. B., Nesterenko A. V., and Polyakov P. A.</b> The effect of the stress state on the deformability of an aluminum matrix composite with 10 vol% SiC particle filler .....	6
<b>Vykhodets V. B. and Kurennykh T. E.</b> Criteria for observing hydrogen tunneling in metals .....	24
<b>Batalov S. V., Bessonov V. D., Teplov V. S., and Telegin A. V.</b> An equivalent model for micromagnetic simulation of the magnetization of ferrimagnetic structures .....	35
<b>Varygina M. P.</b> Numerical analysis of deformation under compression of structures based on triply periodic minimal surfaces .....	47
<b>Pugacheva N. B., Nokhrina A. V., Senaeva E. I., and Savrai R. A.</b> Mechanical properties of an Fe–Ti–Ni–B–C shs composite .....	57
<b>Gubareva K. V. and Eremin A. V.</b> Studying the heat transfer process in a porous medium with a Fischer–Koch S tpms structure .....	70
<b>Soboleva N. N.</b> Analysis of metal microstructure by neural networks, exemplified by segmentation of carbides in composite coatings .....	83
<b>Poroshin V. B. and Ufimtsev A. N.</b> Making a parameter map for the inelastic cyclic deformation of coiled tubing pipes by means of a digital model of test equipment .....	102



**СОДЕРЖАНИЕ**

<b>Вичужанин Д. И., Смирнов С. В., Пугачева Н. Б., Нестеренко А. В., Поляков П. А.</b> Деформируемость алюмоматричного композита В95/10%SiC при обратном выдавливании .....	6
<b>Выходец В. Б., Куренных Т. Е.</b> Критерии для наблюдения туннелирования водорода в металлах .....	24
<b>Баталов С. В., Бессонов В. Д., Теплов В. С., Телегин А. В.</b> Эквивалентная модель для микромагнитного моделирования намагниченности ферромагнитных структур .....	35
<b>Варыгина М. П.</b> Численный анализ деформирования при сжатии структур на основе трижды периодических минимальных поверхностей .....	47
<b>Пугачева Н. Б., Нохрина А. В., Сенаева Е. И., Саврай Р. А.</b> Износостойкость и механические свойства композита системы Fe–Ti–Ni–B–C .....	57
<b>Губарева К. В., Еремин А. В.</b> Исследование процесса теплопереноса в пористой среде со структурой тпмп Фишера – Коха S .....	70
<b>Соболева Н. Н.</b> Анализ микроструктуры металла нейронными сетями на примере сегментации карбидов в композиционных покрытиях .....	83
<b>Порошин В. Б., Уфимцев А. Н.</b> Построение карты параметров неупругого циклического деформирования колтюбинговых труб с помощью цифровой модели испытательной установки .....	102

Received: 10.06.2024

Revised: 29.07.2024



Accepted: 16.08.2024



DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.006-023



## THE EFFECT OF THE STRESS STATE ON THE DEFORMABILITY OF AN ALUMINUM MATRIX COMPOSITE WITH 10 VOL% SiC PARTICLE FILLER



D. I. Vichuzhanin<sup>a, \*</sup>, S. V. Smirnov<sup>b</sup>, N. B. Pugacheva<sup>c</sup>,  
A. V. Nesterenko<sup>d</sup>, and P. A. Polyakov<sup>e</sup>



*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russia*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6508-6859>  [mmm@imach.uran.ru](mailto:mmm@imach.uran.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2083-5377>  [svs@imach.uran.ru](mailto:svs@imach.uran.ru);

<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8015-8120>  [nat@imach.uran.ru](mailto:nat@imach.uran.ru);

<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7010-6260>  [nav@imach.uran.ru](mailto:nav@imach.uran.ru);

<sup>e</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7779-8546>  [smokie84@mail.ru](mailto:smokie84@mail.ru)

\*Corresponding author. Email: [mmm@imach.uran.ru](mailto:mmm@imach.uran.ru)

Address for correspondence: ul. Komsomolskaya, 34, Ekaterinburg, 620049, Russia

Tel.: +7 (343) 362-3027

The effect of the stress state on the deformability of an aluminum matrix composite with 10 vol% of SiC particles is studied by using the damage criterion. Backward extrusion of a standard cup-shaped part is used as an example. The process is simulated by the finite element method to evaluate the stress-strain state and damage. It has been found that, in order to make a high-quality product, it is necessary to carry out extrusion under all-round compression at near-solidus temperatures. A laboratory die was designed and manufactured for the experimental verification of the simulation results. The die is peculiar in that the value of compressive stresses can be controlled during deformation. The extrusion process yields a defect-free product. It has been revealed that heating to near-solidus temperature breaks the initial cellular structure of the composite under external loading.

**Keywords:** damage, fracture locus, aluminum matrix composite, silicon carbide

### Acknowledgment

*The study was carried out in accordance with the state assignment for the Institute of Engineering Science UB RAS, theme No. 124020700063-3. The equipment of the Plastometriya shared research facilities (IES UB RAS) was used in the tests. The simulations were performed with the application of the software installed at the Laboratory of Structural Methods of Analysis and Properties of Materials and Nanomaterials of the shared research facilities affiliated to the Ural Federal University.*

### References

1. Pramanik, A. and Basak, A.K. Fracture and fatigue life of Al-based MMCs machined at different conditions. *Engineering Fracture Mechanics*, 2018, 191, 33–45. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2018.01.013.
2. Huang, S.-J. and Ali, A.N. Effects of heat treatment on the microstructure and microplastic deformation behavior of SiC particles reinforced AZ61 magnesium metal matrix composite. *Materials Science and Engineering: A*, 2018, 711, 670–682. DOI: 10.1016/j.msea.2017.11.020.
3. Kurganova, Yu.A., Kolmakov, A.G., Chen, I., and Kurganov, S.V. Study of mechanical characteristics of advanced aluminum-matrix composites reinforced with SiC and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. *Inorganic Materials: Applied Research*, 2022, 13, 157–160. DOI: 10.1134/S2075113322010245.

4. Gladkovskii, S.V., Petrova, S.V., Cherkasova, T.S., and Patselov, A.M. Structure, physical and mechanical properties of aluminum matrix composites reinforced with carbide particles. *Metal Science and Heat Treatment*, 2023, 65, 54–61. DOI: 10.1007/s11041-023-00891-5.
5. Munasir, N., Triwikantoro, T., Zainuri, M., Bäßler, R., and Darminto, D. Corrosion polarization behavior of Al–SiO<sub>2</sub> composites in IM and related microstructural analysis. *International Journal of Engineering*, 2019, 32 (7), 982–990. DOI: 10.5829/ije.2019.32.07a.11.
6. Dixit, S., Mahata, A., Mahapatra, D.R., Kailas, S.V., and Chattopadhyay, K. Multi-layer graphene reinforced aluminum – manufacturing of high strength composite by friction stir alloying. *Composites Part B: Engineering*, 2018, 136, 63–71. DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.10.028.
7. Hu, Z., Chen, F., Xu, J., Nian, Q., Lin, D., Chen, C., Zhu, X., Chen, Y., and Zhang, M. 3D printing graphene-aluminum nanocomposites. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 746, 269–276. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.02.272.
8. Ogawa, F. and Masuda, C. Fabrication and the mechanical and physical properties of nanocarbon-reinforced light metal matrix composites: a review and future directions. *Materials Science and Engineering: A*, 2021, 820, 141542. DOI: 10.1016/j.msea.2021.141542.
9. Ma, J., Kang, J., and Huang, T. Novel application of ultrasonic cavitation for fabrication of TiN/Al composites. *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, 661, 176–181. DOI: 10.1016/j.jallcom.2015.11.159.
10. Tan, Z., Li, Z., Fan, G., Kai, X., Ji, G., Zhang, L., and Zhang, D. Diamond/aluminum composites processed by vacuum hot pressing: microstructure characteristics and thermal properties. *Diamond and Related Materials*, 2013, 31, 1–5. DOI: 10.1016/j.diamond.2012.10.008.
11. Bharath, V., Nagaral, M., Auradi, V., and Kori, S.A. Preparation of 6061 Al–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> MMC's by stir casting evaluation of mechanical and wear properties. *Procedia Materials*, 2014, 6, 1658. DOI: 10.1016/j.mspro.2014.07.151.
12. Yolshina, L.A., Kvashnichev, A.G., Vichuzhanin, D.I., and Smirnova, E.O. Mechanical and thermal properties of aluminum matrix composites reinforced by in situ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles fabricated via direct chemical reaction in molten salts. *Applied Sciences*, 2022, 12, 8907. DOI: 10.3390/app12178907.
13. Kumar, D., Angra, S., and Singh, S. Mechanical properties and wear behavior of stir cast aluminum metal matrix composite: a review. *International Journal of Engineering*, 2022, 35 (4), 794–801. DOI: 10.5829/ije.2022.35.04a.19.
14. Najimi, A.A. and Shahverdi, H.R. Microstructure and mechanical characterization of Al6061-CNT nanocomposites fabricated by spark plasma sintering. *Materials Characterization*, 2017, 133, 44–53. DOI: 10.1016/j.matchar.2017.09.028.
15. Chen, B., Shen, J., Ye, X., Jia, L., Li, S., Umeda, J., Takahashi, M., and Kondoh, K. Length effect of carbon nanotubes on the strengthening mechanisms in metal matrix composites. *Acta Materialia*, 2017, 140, 317–325. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.048.
16. Gao, X., Yue, H., Guo, E., Zhang, H., Lin, X., Yao, L., and Wang, B. Preparation and tensile properties of homogeneously dispersed graphene reinforced aluminum matrix composites. *Materials & Design*, 2016, 94, 54–60. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.01.034.
17. Çiçek, O., Uslu Tecimer, H., Tan, S.O., Tecimer, H., Orak, İ., and Altındal Ş. Synthesis and characterization of pure and graphene (Gr)-doped organic/polymer nanocomposites to investigate the electrical and photoconductivity properties of Au/n-GaAs structures. *Composites Part B: Engineering*, 2017, 113, 14–23. DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.01.012.
18. Liu, J., Zhang, Z., Lv, Y., Yan, J., Yun, J., Zhao, W., Kou, L., and Zhai, C. Synthesis and characterization of ZnO NWAs/graphene composites for enhanced optical and field emission performances. *Composites Part B: Engineering*, 2016, 99, 336–372. DOI: 10.1016/j.compositesb.2016.05.036.
19. Bozkurt, Y. and Boumerzoug, Z. Tool material effect on the friction stir butt welding of AA2124-T4 alloy matrix MMC. *Journal of Materials Research and Technology*, 2018, 7 (1), 29–38. DOI: 10.1016/j.jmrt.2017.04.001.

20. Zhang, X., Chen, Y., and Hu, J. Recent advances in the development of aerospace materials. *Progress in Aerospace Sciences*, 2018, 97, 22–34. DOI: 10.1016/J.PAEROSCI.2018.01.001.
21. Yusof, N.S.B., Sapuan, S.M., Sultan, M.T.H., Jawaid, M., and Maleque, M.A. Design and materials development of automotive crash box: a review. *Ciência & Tecnologia dos Materiais*, 2017, 29 (3), 129–144. DOI: 10.1016/j.ctmat.2017.09.003.
22. Hamza, M. and Mondal, S. Effect of reinforcement with ceramic microparticles on structure and properties of composites with an aluminum matrix. *Metal Science and Heat Treatment*, 2022, 64 (3), 163–166. DOI: 10.1007/s11041-022-00778-x.
23. Adetunla, A. and Akinlabi, E. Fabrication of aluminum matrix composites for automotive industry via multipass friction stir processing technique. *International Journal of Automotive Technology*, 2019, 20 (6), 1079–1088. DOI: 10.1007/s12239-019-0101-0.
24. Cao, T.S. Models for ductile damage and fracture prediction in cold bulk metal forming processes: a review. *International Journal of Material Forming*, 2015, 10 (2), 1–33. DOI: 10.1007/s12289-015-1262-7.
25. Bogatov, A.A., Mizhiritsky, O.I., and Smirnov S.V. *Resurs plastichnosti metallov pri obrabotke davleniem* [Metal Plasticity Resource Under Metal Forming]. Metallurgiya Publ., Moscow, 1984, 144 p. (In Russian).
26. Bai, Y. and Wierzbicki, T. A new model of metal plasticity and fracture with pressure and Lode dependence. *International Journal of Plasticity*, 2008, 24 (6), 1071–1096. DOI: 10.1016/j.ijplas.2007.09.004.
27. Xue, L. Stress based fracture envelope for damage plastic solids. *Engineering Fracture Mechanics*, 2009, 76, 419–438. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2008.11.010.
28. Khan, A.S. and Liu, H. A new approach for ductile fracture prediction on Al 2024–T351 alloy. *International Journal of Plasticity*, 2012, 35, 1–12. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.01.003.
29. Malcher, L. and Mamiya, E.N. An improved damage evolution law based on continuum damage mechanics and its dependence on both stress triaxiality and the third invariant. *International Journal of Plasticity*, 2014, 56, 232–261. DOI: 10.1016/j.ijplas.2014.01.002.
30. Kolmogorov, V.L., Shishmintsev, V.F., and Matveev, G.A. Ultimate deformability of metals tensile-tested to failure under hydrostatic pressure. *Physics of Metals and Metallography*, 1967, 23 (1), 170–171.
31. Rahmanifard, R., Akhlaghi, F. Effect of extrusion temperature on the microstructure and porosity of A356SiC<sub>p</sub> composites. *Journal of Materials Processing Technology*, 2007, 187–188, 433–436. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2006.11.077.
32. Jia, Y. and Bai, Y. Ductile fracture prediction for metal sheets using all-strain based anisotropic eMMC model. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2016, 115–116, 516–531. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2016.07.022.
33. Vichuzhanin, D.I., Khotinov V.A., and Smirnov, S.V. The effect of the stress state on the ultimate plasticity of steel X80. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2015, 1, 73–89. DOI: 10.17804/2410-9908.2015.1.073-089. Available at: [http://dream-journal.org/issues/2015-1/2015-1\\_21.html](http://dream-journal.org/issues/2015-1/2015-1_21.html)
34. *Kovka i shtampovka*, t. 2: *Goryachaya obyemnaya shtampovka* [Forging and Stamping, Semenova, E.I., ed., Hot Volume Stamping, vol. 2]. Mashinostroenie Publ., Moscow, 2010, 720 p. (In Russian).
35. Vichuzhanin, D.I., Smirnov, S.V., Nesterenko, A.V., and Igumnov, A.S. A fracture locus for a 10 volume-percent B95/SiC metal matrix composite at the near-solidus temperature. *Letters on Materials*, 2018, 8 (1), 88–93. DOI: 10.22226/2410-3535-2018-1-88-93.
36. Pugacheva, N.B., Michurov, N.S., Senaeva, E.I., and Bykova, T.M. Structure and thermophysical properties of aluminum-matrix composites. *The Physics of Metals and Metallography*, 2016, 117 (11), 1144–1151. DOI: 10.1134/S0031918X16110119.

37. Iwasaki, H., Takeuchi, M., Mori, T., Mabuchi, M., and Higashi, K. A comparative study of cavitation characteristics in composite and 7475 aluminum alloy. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1994, 31 (3), 255–260. DOI: 10.1016/0956-716x(94)90279.
38. Mabuchi, M., Higashi, K., and Langdon, T.G. An investigation of the role of a liquid phase in Al Cu Mg metal matrix composites exhibiting high strain rate superplasticity. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1994, 42 (5), 1739–1745. DOI: 10.1016/0956-7151(94)90384-0.
39. Grudev, A.P., Zilberg, Yu.V., and Tilik, V.T. *Trenie i smazki pri obrabotke metallov davleniem* [Friction and Lubricants in Metal Forming by Pressure: Reference Book]. Metallurgiya Publ., Moscow, 1982, 312 p. (In Russian).
40. Pugacheva, N.B., Malygina, I.Yu., Michurov, N.S., Senaeva, E.I., and Antenorova, N.P. Effect of heat treatment on the structure and phase composition of aluminum matrix composites containing silicon carbide. *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2017, 6, 28–36. DOI: 10.17804/2410-9908.2017.6.028-036. Available at: [http://dream-journal.org/issues/2017-6/2017-6\\_161.html](http://dream-journal.org/issues/2017-6/2017-6_161.html)
41. Pugacheva, N.B. and Senaeva, E.I. Influence of Al/SiC composite structure on corrosion damages nature. *AIP Conf. Proc.*, 2016, 1785, 040049. DOI: 10.1063/1.4967106.













Подана в журнал: 10.06.2024  
УДК 620.173:539.431.1:539.422.53  
DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.006-023

## ДЕФОРМИРУЕМОСТЬ АЛЮМОМАТРИЧНОГО КОМПОЗИТА В95/10%SiC ПРИ ОБРАТНОМ ВЫДАВЛИВАНИИ

Д. И. Вичужанин<sup>а, \*</sup>, С. В. Смирнов<sup>б</sup>, Н. Б. Пугачева<sup>в</sup>,  
А. В. Нестеренко<sup>г</sup>, П. А. Поляков<sup>д</sup>

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения  
им. Э. С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук,  
ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, 620049, Россия*

<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6508-6859>  [mmm@imach.uran.ru](mailto:mmm@imach.uran.ru);  
<sup>б</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2083-5377>  [svs@imach.uran.ru](mailto:svs@imach.uran.ru);  
<sup>в</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8015-8120>  [nat@imach.uran.ru](mailto:nat@imach.uran.ru);  
<sup>г</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7010-6260>  [nav@imach.uran.ru](mailto:nav@imach.uran.ru);  
<sup>д</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7779-8546>  [smokie84@mail.ru](mailto:smokie84@mail.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [mmm@imach.uran.ru](mailto:mmm@imach.uran.ru)  
Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, 620049, Россия  
Тел.: +7 (343) 362-30-27

С использованием критерия поврежденности выполнено исследование влияния напряженного состояния на деформационную способность алюмоматричного композита В95/10%SiC на примере обратного выдавливания типовой детали «стакан». Для оценки напряженно-деформированного состояния и поврежденности в процессе выдавливания выполнено моделирование процесса методом конечных элементов. Установлено, что для получения качественного изделия необходимо осуществлять выдавливание в условиях всестороннего сжатия при околосolidусной температуре. Для экспериментальной проверки результатов моделирования спроектирован и изготовлен лабораторный штамп, особенностью которого является возможность регулирования величины сжимающих напряжений в процессе деформации. Получено бездефектное изделие при выдавливании. Установлено, что нагрев до околосolidусной температуры способствует разбиению первоначальной ячеистой структуры композита при внешнем нагружении.

**Ключевые слова:** поврежденность, диаграмма предельной пластичности, алюмоматричный композит, карбид кремния

### 1. Введение

Алюминий и его сплавы наиболее часто используются при создании металломатричных композитов (ММК) в качестве материалов матрицы, которая усиливается различного рода наполнителями: частицами карбида кремния SiC [1–5], углеродных нановолокон, углеродных нанотрубок, графена [6–8], керамическими частицами [9]. Композиты, как правило, производят горячим прессованием [10], литьем [1, 2, 11–13], различными видами спекания порошков [14–16]. Благодаря высокой теплопроводности и низкому коэффициенту термического расширения, высокой жесткости и прочности ММК обладают большим потенциалом применения в качестве конструкционного материала в электронной промышленности [17, 18], машиностроении [19], автомобильной и аэрокосмической промышленности [20–23].

В литературных источниках приводятся в основном стандартные механические свойства металломатричных композитов при комнатной температуре. Данные свойства определены в достаточно узком диапазоне изменения параметров напряженно-деформированного

состояния (в условиях стандартных испытаний), которые не всегда реализуются в процессах пластической деформации.

Весьма актуальной является проблема обоснования выбора оптимальных режимов деформирования композита, позволяющих изготавливать изделия требуемой формы и с требуемым уровнем эксплуатационных свойств. В связи с вышесказанным, большое значение имеет оценка деформационной способности (степени деформации до разрушения) ММК. Оценка деформируемости материала может быть осуществлена в категориях механики поврежденности. Безразмерный скалярный параметр  $\omega$  является основным концептуальным и расчетным параметром моделей механики поврежденности. До деформации  $\omega = 0$ , а в момент возникновения трещины разрушения  $\omega = 1$ . Существует большое количество моделей поврежденности, обзор которых приведен в работе [24].

В данной работе оценка деформируемости ММК осуществляется с использованием феноменологической модели В. Л. Колмогорова [25]:

$$\omega = \int_0^{\Lambda} \frac{d\Lambda}{\Lambda_f(k, \mu_\sigma)}, \quad (1)$$

где  $\Lambda$  – степень деформации сдвига;  $\Lambda_f(k, \mu_\sigma)$  – предельная пластичность или степень деформации сдвига, накопленная к моменту разрушения в условиях монотонного деформирования (при постоянных на всем процессе деформирования величинах  $k$  и  $\mu_\sigma$ ). Значение величины  $\Lambda_f(k, \mu_\sigma)$  в формуле (1) зависит от текущего напряженного состояния материала в процессе деформации. Данная величина является функцией коэффициента напряженного состояния  $k$  и коэффициента Лоде – Надаи  $\mu_\sigma$ :

$$k = \frac{\sigma}{T}; \quad \mu_\sigma = 2 \frac{\sigma_{22} - \sigma_{33}}{\sigma_{11} - \sigma_{33}} - 1, \quad (2)$$

где  $\sigma = \frac{1}{3}(\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})$  – среднее нормальное напряжение;  $T = \sqrt{0,5 S_{ij} S_{ij}}$ , – интенсивность касательных напряжений;  $S_{ij}$  – компоненты девиатора напряжений;  $\sigma_{11}$ ,  $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$  – главные напряжения. Показатель  $k$  характеризует относительный уровень нормальных напряжений: при  $k > 0$  преобладают нормальные растягивающие напряжения, а при  $k < 0$  – сжимающие. Показатель Лоде – Надаи  $\mu_\sigma$  характеризует вид напряженного состояния. При  $\mu_\sigma = +1/-1$  имеет место напряженное состояние осесимметричного сжатия/растяжения. При  $\mu_\sigma = 0$  реализуется схема плоского напряженного состояния.

Совокупность величин  $k$  и  $\mu_\sigma$  однозначно характеризует напряженное состояние при пластической деформации. Графическая интерпретация функции  $\Lambda_f(k, \mu_\sigma)$  называется диаграммой предельной пластичности материала.

Для того чтобы оценить поврежденность материала в процессе пластической деформации, необходимо предварительно определить функцию  $\Lambda_f(k, \mu_\sigma)$ . Для этого существуют различные виды испытаний пластичности материала. При  $\mu_\sigma = -1$  в условиях растягивающих напряжений используют испытания на растяжение цилиндрических образцов [26–29], а в условиях сжимающих напряжений может применяться техника высоких давлений [30, 31]. Для исследований пластичности материала в условиях  $\mu_\sigma = 0$  используют испытания на кручение цилиндрических образцов, а также испытания на сдвиг с растяжением и сжатием [29, 32]. При  $\mu_\sigma = +1$  используют испытания на сжатие цилиндрических образцов [28], а также испытания на выдавливание образцов в виде толстостенного стаканчика [33].

В настоящей работе исследован металломатричный композит на основе сплава системы Al–Zn–Mg–Cu с наполнителем из частиц SiC (10 об. %). Выполнена оценка деформаци-



онной способности исследованного материала на примере изготовления типовой детали типа «стакан» (по классификации Е. И. Семенова [34]) методом обратного выдавливания.

Целью работы является оценка (с использованием механики поврежденности) возможности изготовления детали конструкционного назначения из данного композита, а также разработка и реализация в лабораторных условиях технологического процесса ее изготовления.

## 2. Материал и методика исследования

Исследованный ММК имеет матрицу из высокопрочного алюминиевого сплава системы Al–Zn–Mg–Cu следующего химического состава (в масс. %): 5–7 Zn; 1,8–2,8 Mg; 1,4–2 Cu; до 0,5 Fe; до 0,5 Si; 0,2–0,6 Mn; 0,1–0,25 Cr; до 0,05 Ni; до 0,05 Ti. В качестве наполнителя использовали частицы SiC. Синтез ММК осуществлен во Всероссийском научно-исследовательском институте авиационных материалов (ВИАМ). Композит получен по технологии порошковой металлургии путем спекания смеси порошков алюминиевого сплава и карбида кремния. Количественный анализ показал, что среднее содержание SiC по объему составляло 10 об. %. Средний размер частиц наполнителя SiC – 12 мкм (рис. 1). Исследование микроструктуры и характера расположения частиц карбида кремния на поверхности полированных нетравленных шлифов, выполненных на продольном резе детали «стакан», проведено с помощью сканирующего электронного микроскопа Tescan Vega II XMU с энергодисперсионной приставкой Oxford для рентгеновского энергодисперсионного микроанализа INCA Energy 450. Структурная особенность исследованного композита заключалась в том, что исходная заготовка имела ячеистую структуру: частицы карбида кремния расположены по границам матричных гранул, образуя сетку (рис. 2).

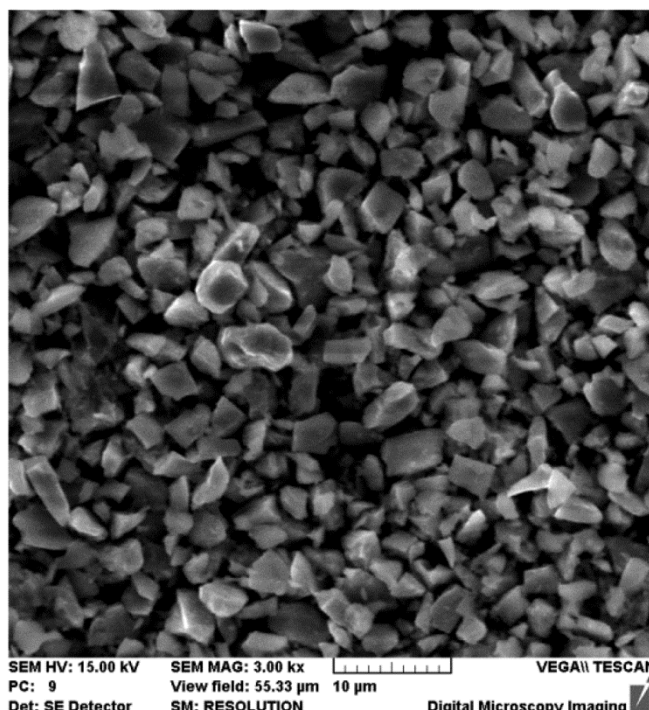


Рис. 1. Морфологическая форма частиц карбида кремния SiC, использованного при изготовлении исследованного композита

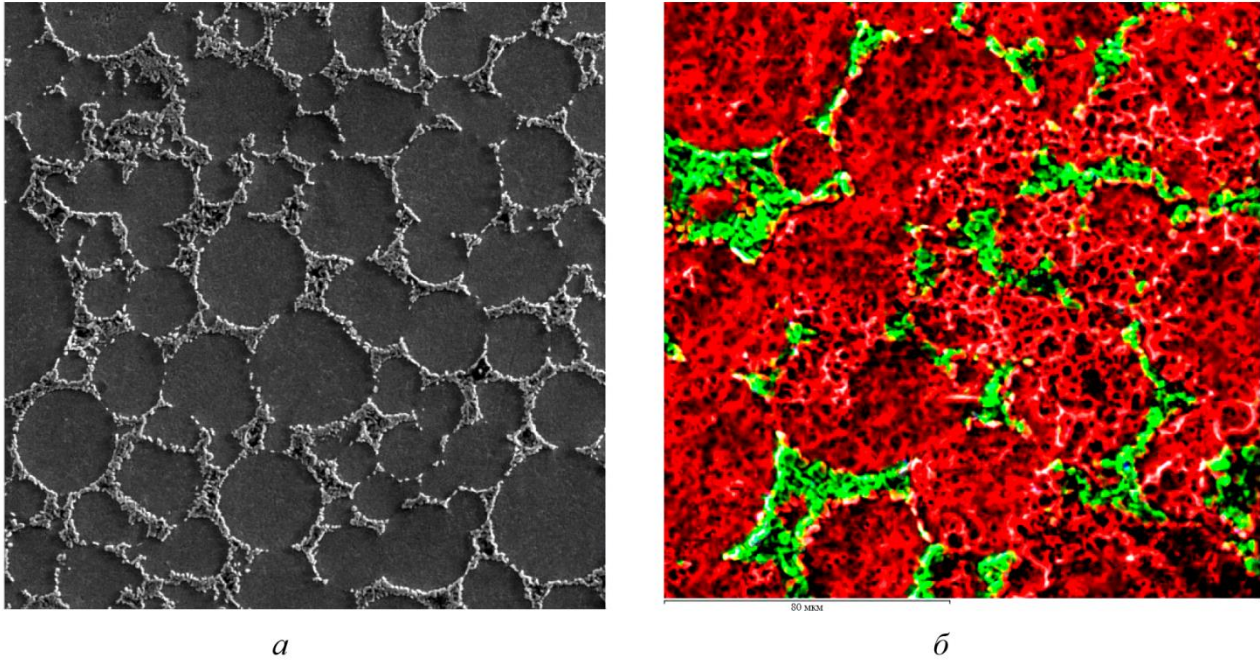


Рис. 2. Микроструктура (а) и характер распределения (б) алюминия (красный) и кремния (зеленый) в исследованном ММК

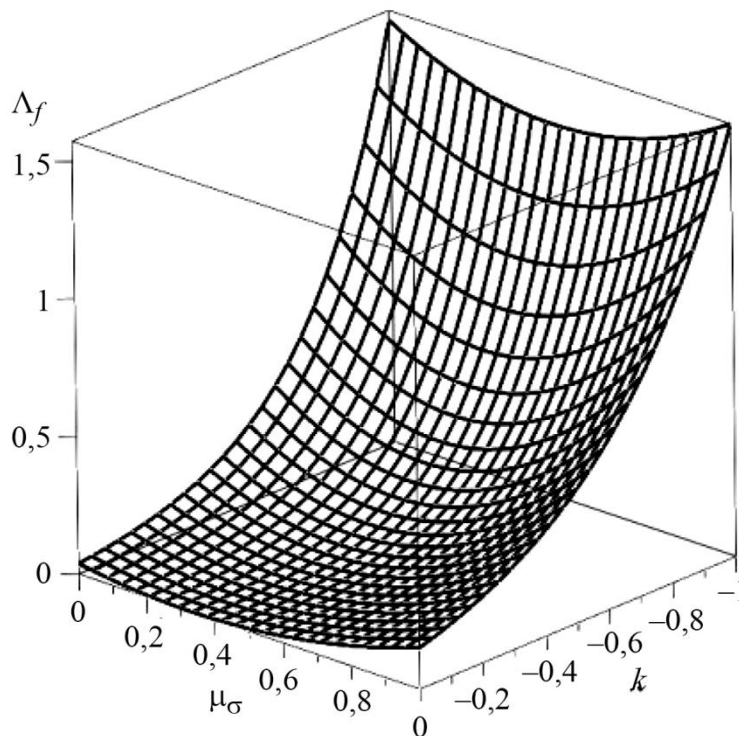


Рис. 3. Диаграмма предельной пластичности ММК [35]

Диаграмма предельной пластичности композита [35] приведена на рис. 3. Диаграмма построена по результатам испытаний при температуре 570 °С, которая является околосолидусной [36] для исследуемого ММК. Такая температура испытаний выбрана потому, что для ММК на основе алюминиевых сплавов представляется перспективным увеличение температур технологической деформации вплоть до околосолидусных, так как это приводит к снижению интенсивности образования микропористости на частицах SiC [31] и, как следствие,

улучшению деформационных свойств ММК [37, 38]. Для исследования предельной пластичности в работе [35] использовали следующие виды испытаний: растяжение гладких (без выточки) цилиндрических образцов, растяжение цилиндрических образцов с концентраторами напряжений (выточкой на боковой поверхности), сжатие цилиндрических образцов, кручение цилиндрических образцов, сжатие и растяжение образцов типа «колокольчик», выдавливание доньшка толстостенного стаканчика с подпором и без подпора. По результатам испытаний на растяжение различных видов образцов было установлено, что материал разрушается хрупко в условиях растягивающих напряжений для всех видов образцов. В связи с вышесказанным принципы разработки технологического процесса изготовления детали конструкционного назначения должны основываться на положении о том, что процесс изготовления детали должен осуществляться в условиях преобладающих сжимающих напряжений.

В качестве детали конструкционного назначения рассматривалась осесимметричная деталь типа стакана (рис. 4). Для оценки напряженно-деформированного состояния ММК в процессе изготовления детали выполнено математическое моделирование методом конечных элементов в пакете конечно-элементного анализа Deform. Для оценки адекватности результатов моделирования выполнено сравнение усилия деформирования в процессе испытания с усилием, полученным в результате моделирования. Отличие данных величин не превышает 9 %. Все испытания проведены на сервогидравлической испытательной установке Instron 8801 при температуре 570 °С. Температура образцов контролировалась хромель-копелевой термопарой.

### 3. Моделирование процесса изготовления детали «стакан»

Детали типа стакана обычно изготавливают путем обратного выдавливания цилиндрической заготовки. В процессе моделирования для материала ММК принималась изотропная жесткопластическая модель. Материал деформирующего инструмента рассматривался как жесткое тело. Кривая упрочнения ММК определена в работе [35].

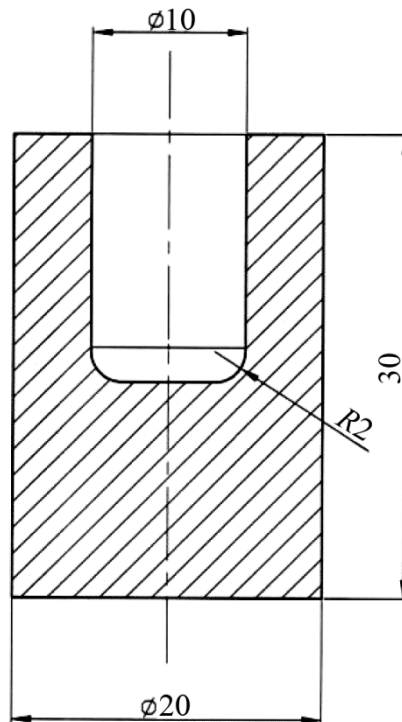


Рис. 4. Чертеж детали «стакан»



В качестве смазки между образцом и бойками использовали смазку на основе графита. Трение между деформирующим инструментом и ММК учитывали с помощью закона трения Зибеля. Величину коэффициента трения определяли методом осадки двух образцов [39]. По результатам испытаний коэффициент трения установлен равным 0,29. Расчеты напряженно-деформированного состояния выполнены с использованием 2D-модели в предположении осесимметричного деформированного состояния. Так как деталь является симметричной, то моделировалась только половина ее сечения. На рис. 5 в левой части представлена конечно-элементная модель до деформации, в правой части – после деформации. Модель состоит из неподвижного основания 1, неподвижного цилиндрического контейнера 2 и подвижного пуансона 3, который внедряется в заготовку 4.

На рис. 6 приведено распределение эффективных деформаций  $\epsilon_{eff}$  и поврежденности  $\omega$  по сечению детали в конце процесса выдавливания. Величину поврежденности здесь рассчитывали по формуле (1) при помощи пользовательской подпрограммы `usr_dmg.f`, код которой написан авторами, после чего подпрограмма интегрирована в Deform. В связи с тем, что в процессе расчета приращения деформации на каждом шаге незначительные, было сделано допущение о постоянстве величины  $\Lambda_{fi}(k_i, \mu_{\sigma_i})$  на шаге расчета. При этом формула (1) для конечно-элементной реализации, в соответствии с принципом линейного суммирования поврежденности, использовалась в следующем виде:

$$\omega = \sum_{i=1}^n \frac{\Delta \Lambda_i}{\Lambda_{fi}(k_i, \mu_{\sigma_i})}, \quad (3)$$

где  $n$  – количество шагов расчета.

Из рис. 6 видно, что в процессе выдавливания материал претерпевает значительные пластические деформации, которые концентрируются под пуансоном и на контакте с его боковой поверхностью. При этом расчетная поврежденность на большей части выдавленного объема металла равна единице. Это говорит о том, что металл в этих местах подвергается разрушению. Данное явление объясняется тем, что с самого начала и на протяжении всего процесса выдавливания в очаге деформации существуют зоны с преобладающими растягивающими напряжениями ( $k > 0$ ), в которых материал разрушается хрупко даже при небольших пластических деформациях. На рис. 7 эти области обозначены красным цветом.

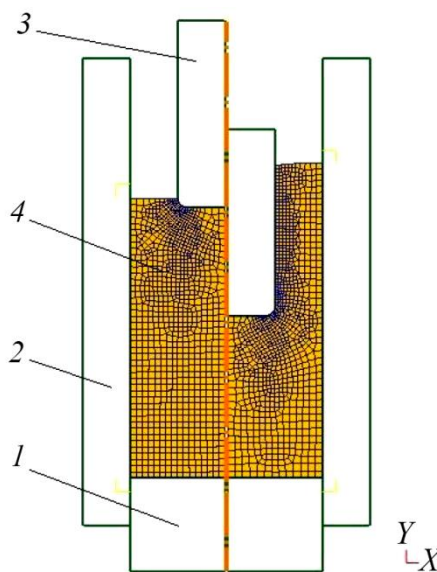


Рис. 5. Конечно-элементная модель выдавливания детали «стакан»

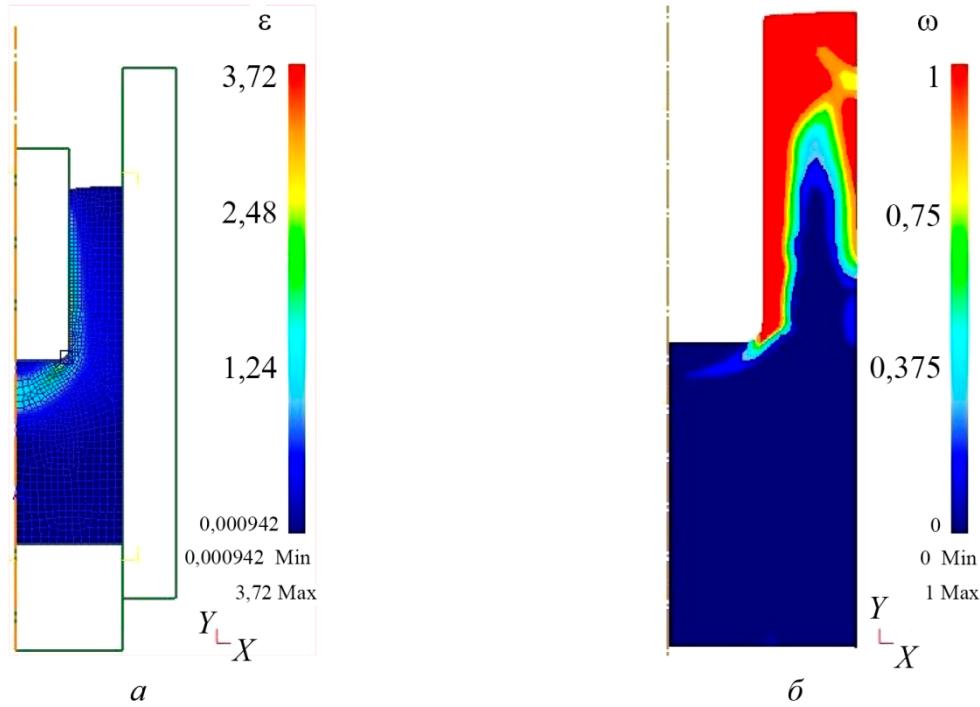


Рис. 6. Распределение эквивалентных пластических деформаций  $\varepsilon_{eff}$  (а) и поврежденности  $\omega$  (б) по сечению детали «стакан» в конце процесса выдавливания

Чтобы исключить возникновение областей с растягивающими напряжениями, предлагается осуществлять процесс выдавливания детали «стакан» с подпором свободной поверхности ММК. На рис. 8 в левой части представлена конечно-элементная модель до деформации, а в правой части – после деформации. Модель состоит из подвижного основания 1, к которому перед началом процесса выдавливания прикладывается «подпирающее» давление  $p$ , неподвижного цилиндрического контейнера 2 и подвижного пуансона 3, который внедряется в заготовку 4.

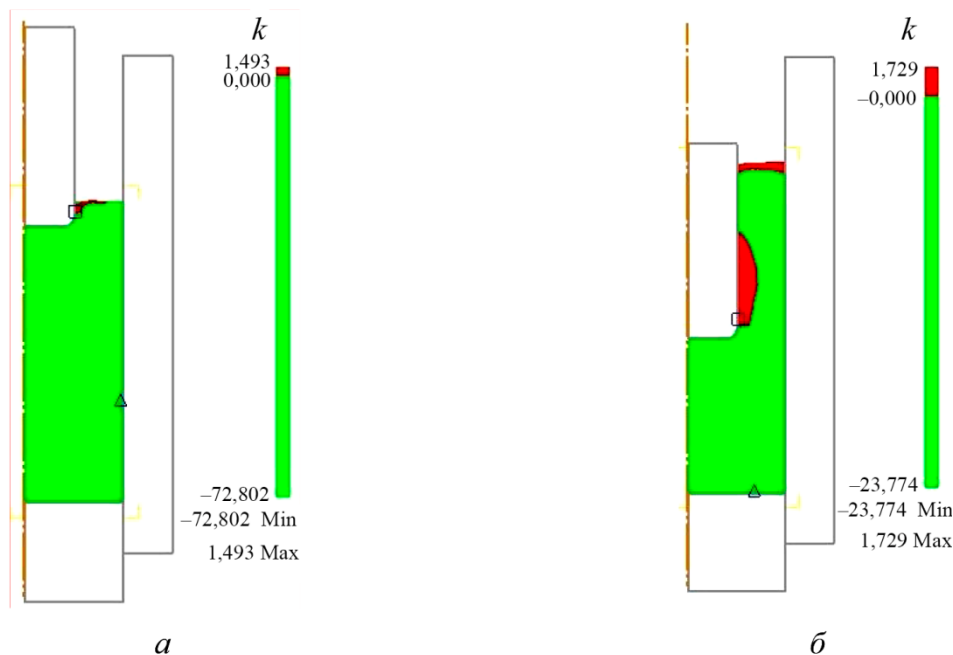


Рис. 7. Распределение значений коэффициента напряженного состояния  $k$  в начале (а) и в конце (б) процесса выдавливания

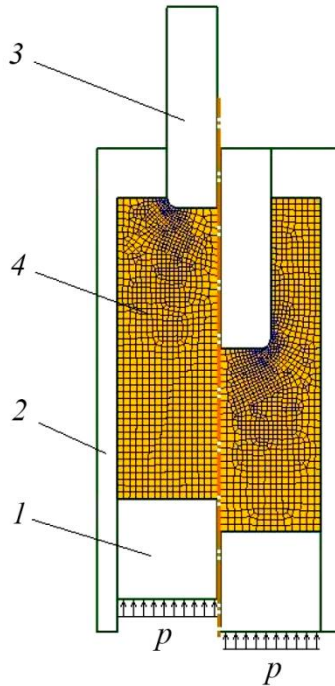


Рис. 8. Конечно-элементная модель выдавливания детали «стакан» с подпором свободной поверхности ММК

Согласно [25], в общем случае можно выделить два критических значения поврежденности:  $\omega^* = 0,2 \div 0,4$  и  $\omega^{**} = 0,6 \div 0,8$ . В случае если в конце деформации поврежденность находится в интервале  $0 < \omega < \omega^*$ , то при последующей термообработке наблюдается полное залечивание поврежденности. Если значение поврежденности в конце процесса деформирования находится в интервале  $\omega^* < \omega < \omega^{**}$ , то при последующем отжиге поврежденность залечивается не полностью. При этом значения  $\omega^*$  и  $\omega^{**}$  неодинаковы для разных материалов. В связи с вышесказанным, чтобы полностью исключить возможность разрушения детали «стакан» в процессе выдавливания, было подобрано такое значение давления  $p = 79,5$  МПа, чтобы значение поврежденности в конце процесса выдавливания не превышало 0,15. На рис. 9 приведено распределение поврежденности  $\omega$  по сечению детали «стакан» в конце процесса выдавливания с подпором.

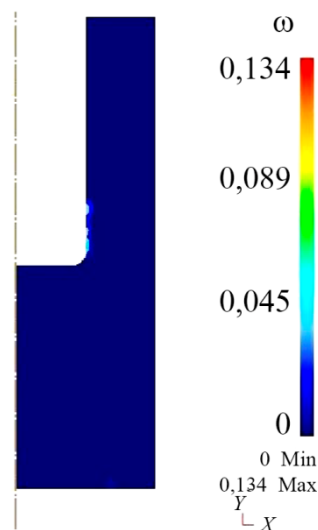


Рис. 9. Распределение поврежденности  $\omega$  по сечению детали «стакан» в конце процесса выдавливания с подпором

#### 4. Экспериментальные исследования процесса изготовления детали «стакан»

Для экспериментальной проверки результатов моделирования спроектирован и изготовлен лабораторный штамп для выдавливания детали «стакан» (рис. 10).

Перед испытанием штамп помещается в нагревательную печь 1 испытательной машины. Температура заготовки контролируется хромель-копелевой термопарой 2. Штамп состоит из двухслойного контейнера 3, внутрь которого устанавливается заготовка из ММК 4. Сверху на заготовку устанавливается боек 5, который упирается в верхнюю неподвижную штангу испытательной машины 6. Особенностью конструкции штампа является то, что за счет изменения усилия подпора он позволяет в широком диапазоне варьировать жесткость напряженного состояния (значения коэффициента  $k$ ) в процессе изготовления детали. Для этого в конструкции штампа предусмотрена опора 7, которая устанавливается на основание 8 нижнего подвижного захвата испытательной машины. Перед началом испытания к основанию нижнего захвата 8 прикладывается необходимое сжимающее усилие, которое передается на заготовку через опору 7, втулку 9 и кольцо 10. В нашем случае это усилие равно 2,5 кН, при этом на контакте между бойком 5 и заготовкой 4 возникает давление  $p = 79,5$  МПа. В заготовке возникает напряженное состояние всестороннего сжатия (мягкое напряженное состояние). Процесс выдавливания осуществляется за счет перемещения вверх гидроцилиндра 11 нижнего захвата испытательной машины, который, в свою очередь, перемещает фланец 12, шпильку 13 и пуансон 14 штампа. При этом поддерживается первоначальное сжимающее усилие, приложенное к основанию нижнего захвата 8, который в процессе выдавливания перемещается вниз на некоторое расстояние.

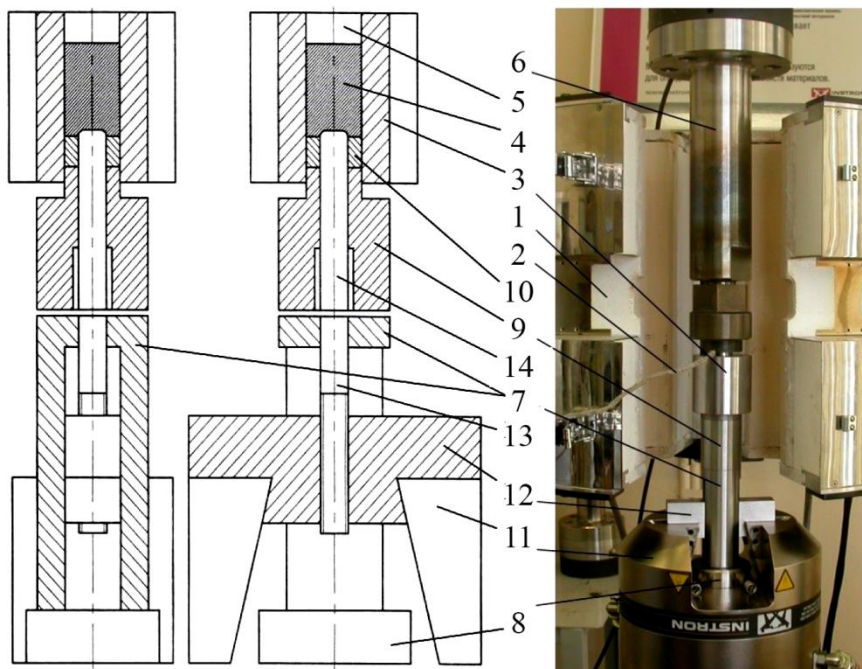


Рис. 10. Лабораторный штамп для изготовления детали «стакан»

В результате выдавливания получено готовое изделие «стакан» (рис. 11 а). На изделии трещин не обнаружено. Выполнено также выдавливание детали «стакан» без подпора. При этом на внутренней и внешней боковой поверхности изделия образовались трещины (рис. 11 б). Таким образом, экспериментальные результаты хорошо согласуются с результатами расчета поврежденности методом конечных элементов.





Рис. 11. Фотографии детали «стакан»: выдавливание с подпором (а); выдавливание без подпора (б) (деталь разрезана)

Выполненные ранее исследования показали, что при нагреве исследованного ММК при температуре 534 °С происходит эвтектическое превращение  $\alpha + S(\text{Al}_2\text{CuMg}) \rightarrow L$ , сопровождающееся эндотермическим эффектом. Это приводит к локальному появлению жидкой фазы на межфазной границе между  $\alpha$ -твердым раствором на основе алюминия и игольчатыми частицами  $S$ -фазы  $\text{Al}_2\text{CuMg}$ . Чаще всего появление продуктов эвтектического превращения характерного скелетообразного строения наблюдали в образцах ММК, подвергнутых термической обработке без действия внешней нагрузки, на участках скопления частиц карбида кремния [40], создающих дополнительные межфазные границы, в которые может затекать образовавшийся расплав алюминия. Этот эффект можно использовать для уменьшения внутренней микропористости ММК на участках скопления частиц наполнителя, которая неизбежно возникает после спекания заготовок.

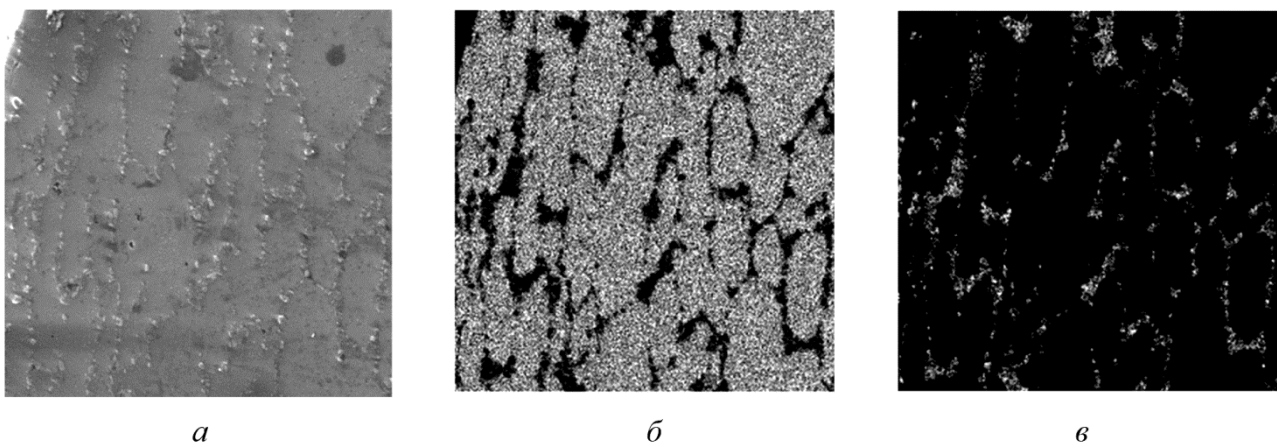


Рис. 12. Микроструктура (а) и распределение алюминия (б) и кремния (в) в зоне максимальных значений эквивалентной пластической деформации

При анализе структурного состояния различных зон полученного в результате выдавливания изделия «стакан» на продольном сечении обнаружено, что изменения структуры определяются степенью деформации материала зоны. Так, в зоне возможных максимальных значений эквивалентной пластической деформации (рис. 6 а) наблюдали вытягивание ячеистой структуры композита вдоль направления деформации (рис. 12), тогда как в зонах с минимальными деформациями структура сохраняется практически в исход-

ном состоянии (правая часть структуры на рис. 13 *а*). На всех участках поверхности исследованного продольного реза стакана произошло уменьшение внутренней микропористости за счет затекания под давлением во время выдавливания образовавшегося в результате эвтектического превращения расплава алюминия между частицами карбида кремния. В максимальной степени этот эффект проявился в зонах с максимальными расчетными значениями эквивалентной пластической деформации. Ячеистая структура композита разбивается (левая часть структуры на рис. 13 *а*). В результате каждая частица наполнителя SiC оказалась окружена алюминиевой матрицей (рис. 13 *б*). Единичные микропоры наблюдали в зонах минимальных деформаций.

Разбиение ячеистой структуры ММК улучшает последующие эксплуатационные свойства детали. Например, было показано [41], что коррозионная стойкость таких ММК определяется характером распределения частиц наполнителя по объему композита, поскольку коррозионные повреждения происходят за счет окисления матрицы по интерфейсу «матрица – наполнитель», что в дальнейшем приводит к образованию питтингов и отслоений. В случае равномерного распределения частиц наполнителя коррозионному повреждению препятствует отсутствие протяженных межфазных границ, тогда как ячеистая структура композита обеспечивает наличие протяженных извилистых границ между частицами SiC и матрицей.

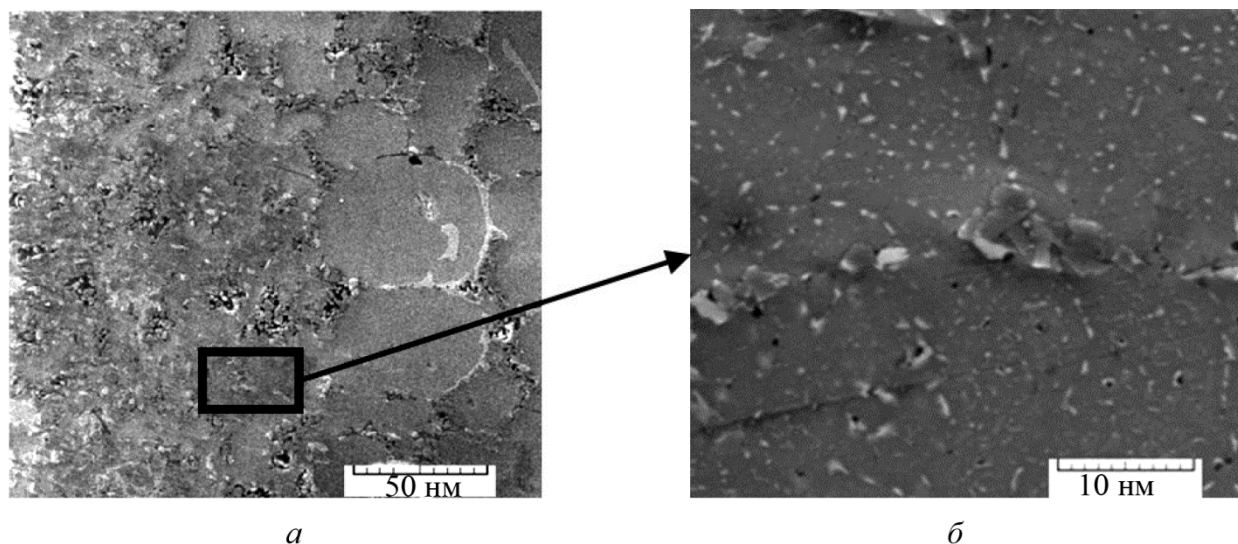


Рис. 13. Микроструктура ММК в зоне максимальных деформаций, возникающих при выдавливании детали «стакан»: в левой части ячеистая структура разбита, а в правой сохранилась (*а*); все частицы наполнителя SiC окружены алюминиевой матрицей (*б*)

## 5. Заключение

Методом конечных элементов выполнено моделирование процесса выдавливания с подпором детали «стакан». Особенностью процесса является то, что выдавливание осуществляется в условиях мягкого напряженного состояния (в состоянии всестороннего сжатия). Определены параметры процесса, необходимые для получения качественной детали, при этом рассчитанная поврежденность не превышает значения 0,15. Спроектирован лабораторный штамп для выдавливания с подпором детали «стакан» при температуре 570 °С. Усилие подпора регулируется, что позволяет выполнять процесс выдавливания в условиях требуемой величины сжимающих напряжений. Осуществлен процесс выдавливания, и получено бездефектное изделие. Выполнено выдавливание детали «стакан» без подпора. Установлено, что при таких параметрах процесса получить качественное изделие не удастся. Показано, что локальное появление расплава алюминия вблизи участков скопления частиц наполнителя SiC в результате эвтектического превращения  $\alpha + S(\text{Al}_2\text{CuMg}) \rightarrow L$  при нагреве выше темпе-

ратуры 534 °С способствует разбиению ячеистой структуры при внешнем нагружении, равномерному перераспределению частиц SiC в зонах максимальных деформаций и залечиванию микропор в местах исходного скопления частиц SiC.

### Благодарность

*Работа выполнена в соответствии с государственным заданием ИМАШ УрО РАН № 124020700063-3. Испытания проведены на оборудовании ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН. При проведении моделирования использовано программное обеспечение лаборатории структурных методов анализа и свойств материалов и наноматериалов ЦКП УрФУ.*

### Литература

1. Pramanik A., Basak A. K. Fracture and fatigue life of Al-based MMCs machined at different conditions // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2018. – Vol. 191. – P. 33–45. – DOI: 10.1016/j.engfracmech.2018.01.013.
2. Huang S.-J., Ali A. N. Effects of heat treatment on the microstructure and microplastic deformation behavior of SiC particles reinforced AZ61 magnesium metal matrix composite // *Materials Science and Engineering: A*. – 2018. – Vol. 711. – P. 670–682. – DOI: 10.1016/j.msea.2017.11.020.
3. Study of mechanical characteristics of advanced aluminum–matrix composites reinforced with SiC and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Yu. A. Kurganova, A. G. Kolmakov, I. Chen, S. V. Kurganov // *Inorganic Materials: Applied Research*. – 2022. – Vol. 13. – P. 157–160. – DOI: 10.1134/S2075113322010245.
4. Structure, physical and mechanical properties of aluminum matrix composites reinforced with carbide particles / S. V. Gladkovskii, S. V. Petrova, T. S. Cherkasova, A. M. Patselov // *Metal Science and Heat Treatment*. – 2023. – Vol. 65. – P. 54–61. – DOI: 10.1007/s11041-023-00891-5.
5. Corrosion polarization behavior of Al–SiO<sub>2</sub> composites in 1M and related microstructural analysis / N. Munasir, T. Triwikantoro, M. Zainuri, R. Bäßler, D. Darminto // *International Journal of Engineering*. – 2019. – Vol. 32 (7). – P. 982–990. – DOI: 10.5829/ije.2019.32.07a.11.
6. Multi-layer graphene reinforced aluminum – manufacturing of high strength composite by friction stir alloying / S. Dixit, A. Mahata, D. R. Mahapatra, S. V. Kailas, K. Chattopadhyay // *Composites Part B: Engineering*. – 2018. – Vol. 136. – P. 63–71. – DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.10.028.
7. 3D printing graphene-aluminum nanocomposites / Z. Hu, F. Chen, J. Xu, Q. Nian, D. Lin, Ch. Chen, X. Zhu, Y. Chen, M. Zhang // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2018. – Vol. 746. – P. 269–276. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.02.272.
8. Ogawa F., Masuda C. Fabrication and the mechanical and physical properties of nanocarbon-reinforced light metal matrix composites: a review and future directions // *Materials Science and Engineering: A*. – 2021. – Vol. 820. – P. 141542. – DOI: 10.1016/j.msea.2021.141542.
9. Ma J., Kang J., Huang T. Novel application of ultrasonic cavitation for fabrication of TiN/Al composites // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2016. – Vol. 661. – P. 176–181. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2015.11.159.
10. Diamond/aluminum composites processed by vacuum hot pressing: microstructure characteristics and thermal properties / Z. Tan, Z. Li, G. Fan, X. Kai, G. Ji, L. Zhang, D. Zhang // *Diamond and Related Materials*. – 2013. – Vol. 31. – P. 1–5. – DOI: 10.1016/j.diamond.2012.10.008.
11. Preparation of 6061 Al–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> MMC's by stir casting evaluation of mechanical and wear properties / V. Bharath, M. Nagaral, V. Auradi, S. A. Kori // *Procedia Materials Science*. – 2014. – Vol. 6. – P. 1658–1667. – DOI: 10.1016/j.mspro.2014.07.151.
12. Mechanical and thermal properties of aluminum matrix composites reinforced by in situ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles fabricated via direct chemical reaction in molten salts / L. A. Yolshina, A. G. Kвашnichev, D. I. Vichuzhanin, E. O. Smirnova // *Applied Sciences*. – 2022. – Vol. 12 (17). – P. 8907. – DOI: 10.3390/app12178907.



13. Kumar D., Angra S., Singh S. Mechanical properties and wear behavior of stir cast aluminum metal matrix composite: a review // *International Journal of Engineering*. – 2022. – Vol. 35 (4). – P. 794–801. – DOI: 10.5829/ije.2022.35.04a.19.
14. Najimi A. A., Shahverdi H. R. Microstructure and mechanical characterization of Al6061-CNT nanocomposites fabricated by spark plasma sintering // *Materials Characterization*. – 2017. – Vol. 133. – P. 44–53. – DOI: 10.1016/j.matchar.2017.09.028.
15. Equilibrium composition variation of Q-phase precipitates in aluminum alloys / B. Chen, J. Shen, X. Ye, L. Jia, S. Li, J. Umeda, M. Takahashi, K. Kondoh // *Acta Materialia*. – 2017. – Vol. 140. – P. 317–325. – DOI: 10.1016/j.actamat.2017.08.048.
16. Preparation and tensile properties of homogeneously dispersed graphene reinforced aluminum matrix composite / X. Gao, H. Yue, E. Guo, H. Zhang, X. Lin, L. Yao, B. Wang // *Materials & Design*. – 2016. – Vol. 94. – P. 54–60. – DOI: 10.1016/j.matdes.2016.01.034.
17. Synthesis and characterization of pure and graphene (Gr)-doped organic/polymer nanocomposites to investigate the electrical and photoconductivity properties of Au/n-GaAs structures / O. Çiçek, H. Uslu Tecimer, S. O. Tan, H. Tecimer, İ. Orak, Ş. Altındal // *Composites Part B: Engineering*. – 2017. – Vol. 113. – P. 14–23. – DOI: 10.1016/j.compositesb.2017.01.012.
18. Synthesis and characterization of ZnO NWAs/graphene composites for enhanced optical and field emission performances / J. Liu, Z. Zhang, Y. Lv, J. Yan, J. Yun, W. Zhao, L. Kou, C. Zhai // *Composites Part B: Engineering*. – 2016. – Vol. 99. – P. 336–372. – DOI: 10.1016/j.compositesb.2016.05.036.
19. Bozkurt Y., Boumerzoug Z. Tool material effect on the friction stir butt welding of AA2124-T4 alloy matrix MMC // *Journal of Materials Research and Technology*. – 2018. – Vol. 7 (1). – P. 29–38. – DOI: 10.1016/j.jmrt.2017.04.001.
20. Zhang X., Chen Y., Hu J. Recent advances in the development of aerospace materials // *Progress in Aerospace Sciences*. – 2018. – Vol. 97. – P. 22–34. – DOI: 10.1016/j.paerosci.2018.01.001.
21. Design and materials development of automotive crash box: a review / N. S. B. Yusof, S. M. Sapuan, M. T. H. Sultan, M. Jawaid, M. A. Maleque // *Ciência & Tecnologia dos Materiais*. – 2017. – Vol. 29 (3). – P. 129–144. – DOI: 10.1016/j.ctmat.2017.09.003.
22. Hamza M., Mondal S. Effect of reinforcement with ceramic microparticles on structure and properties of composites with an aluminum matrix // *Metal Science and Heat Treatment*. – 2022. – Vol. 64 (3). – P. 163–166. – DOI: 10.1007/s11041-022-00778-x.
23. Adetunla A., Akinlabi E. Fabrication of aluminum matrix composites for automotive industry via multipass friction stir processing technique // *International Journal of Automotive Technology*. – 2019. – Vol. 20 (6). – P. 1079–1088. – DOI: 10.1007/s12239-019-0101-0.
24. Cao T. S. Models for ductile damage and fracture prediction in cold bulk metal forming processes: a review // *International Journal of Material Forming*. – 2015. – Vol. 10 (2). – P. 1–33. – DOI: 10.1007/s12289-015-1262-7.
25. Богатов А. А., Мижирицкий О. И., Смирнов С. В. Ресурс пластичности металлов при обработке давлением. – М. : Metallurgy, 1984. – 144 с.
26. Bai Y., Wierzbicki T. A new model of metal plasticity and fracture with pressure and Lode dependence // *International Journal of Plasticity*. – 2008. – Vol. 24 (6). – P. 1071–1096. – DOI: 10.1016/j.ijplas.2007.09.004.
27. Xue L. Stress based fracture envelope for damage plastic solids // *Engineering Fracture Mechanics*. – 2009. – Vol. 76 (3). – P. 419–438. – DOI: 10.1016/j.engfractmech.2008.11.010.
28. Khan A. S., Liu H. A new approach for ductile fracture prediction on Al 2024–T351 alloy // *International Journal of Plasticity*. – 2012. – Vol. 35. – P. 1–12. – DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.01.003.
29. Malcher L., Mamiya E. N. An improved damage evolution law based on continuum damage mechanics and its dependence on both stress triaxiality and the third invariant // *International Journal of Plasticity*. – 2014. – Vol. 56. – P. 232–261. – DOI: 10.1016/j.ijplas.2014.01.002.
30. Kolmogorov V. L., Shishmintsev V. F., Matveev G. A. Ultimate deformability of metals tensile-tested to failure under hydrostatic pressure // *Physics of Metals and Metallography*. –

31. 1967. – Vol. 23 (1). – P. 170–171.
32. Rahmanifard R., Akhlaghi F. Effect of extrusion temperature on the microstructure and porosity of A356SiC<sub>p</sub> composites // *Journal of Materials Processing Technology*. – 2007. – Vols. 187–188. – P. 433–436. – DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2006.11.077.
33. Jia Y., Bai Y. Ductile fracture prediction for metal sheets using all-strain-based anisotropic eMMC model // *International Journal of Mechanical Sciences*. – 2016. – Vols. 115–116. – P. 516–531. – DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2016.07.022.
34. Vichuzhanin D. I., Khotinov V. A., Smirnov S. V. The effect of the stress state on the ultimate plasticity of steel X80 // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. – 2015. – Iss. 1. – P. 73–89. – DOI: 10.17804/2410-9908.2015.1.073-089. – URL: [http://dream-journal.org/issues/2015-1/2015-1\\_21.html](http://dream-journal.org/issues/2015-1/2015-1_21.html)
35. Ковка и штамповка : справочник : в 4 т. Т. 2. Горячая объемная штамповка / под общ. ред. Е. И. Семенова. – 2-е изд., перераб. и доп.– М. : Машиностроение, 2010. – 720 с.
36. A fracture locus for a 10 volume-percent B95/SiC metal matrix composite at the near-solidus temperature / D. I. Vichuzhanin, S. V. Smirnov, A. V. Nesterenko, A. S. Igumnov // *Letters on Materials*. – 2018. – Vol. 8 (1). – P. 88–93. – DOI: 10.22226/2410-3535-2018-1-88-93.
37. Structure and thermophysical properties of aluminum-matrix composites / N. B. Pugacheva, N. S. Michurov, E. I. Senaeva, T. M. Bykova // *The Physics of Metals and Metallography*. – 2016. – Vol. 117 (11). – P. 1144–1151. – DOI: 10.1134/S0031918X16110119.
38. A comparative study of cavitation characteristics in composite and 7475 aluminum alloy / H. Iwasaki, M. Takeuchi, T. Mori, M. Mabuchi, K. Higashi // *Scripta Metallurgica et Materialia*. – 1994. – Vol. 31 (3). – P. 255–260. – DOI: 10.1016/0956-716x(94)90279.
39. Mabuchi M., Higashi K., Langdon T. G. An investigation of the role of a liquid phase in Al Cu Mg metal matrix composites exhibiting high strain rate superplasticity // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1994. – Vol. 42 (5). – P. 1739–1745. – DOI: 10.1016/0956-7151(94)90384-0.
40. Грудев А. П., Зильберг Ю. В., Тилик В. Т. Трение и смазки при обработке металлов давлением. – М. : Металлургия, 1982. – 312 с.
41. Effect of heat treatment on the structure and phase composition of aluminum matrix composites containing silicon carbide / N. B. Pugacheva, I. Yu. Malygina, N. S. Michurov, E. I. Senaeva, N. P. Antenorova // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. – 2017. – Iss. 6. – P. 28–36. – DOI: 10.17804/2410-9908.2017.6.028-036. – URL: [http://dream-journal.org/issues/2017-6/2017-6\\_161.html](http://dream-journal.org/issues/2017-6/2017-6_161.html)
42. Pugacheva N. B., Senaeva E. I. Influence of Al/SiC composite structure on corrosion damages nature // *AIP Conf. Proc.* – 2016. – Vol. 1785. – P. 040049. – DOI: 10.1063/1.4967106.

Received: 22.06.2024

Revised: 22.07.2024



Accepted: 16.08.2024



DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.024-034

## CRITERIA FOR OBSERVING HYDROGEN TUNNELING IN METALS

V. B. Vykhodets<sup>a</sup> and T. E. Kurennykh<sup>b, \*</sup>

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620137, Russia*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9522-9147>  [vykhod@imp.uran.ru](mailto:vykhod@imp.uran.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9859-3374>  [kurennykh@imp.uran.ru](mailto:kurennykh@imp.uran.ru)

\*Corresponding author. Email: [kurennykh@imp.uran.ru](mailto:kurennykh@imp.uran.ru)

Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620108, Russia

Tel.: +7 (343) 378-3846

Based on the analysis of the results of theoretical and experimental research, this study develops criteria that metals must meet for it to be possible to observe hydrogen tunneling in metals, as well as methods for measuring quantum diffusion coefficients. Firstly, the distance between the nearest equilibrium positions of hydrogen atoms in the metal lattice must be small enough, about 0.15 nm. Secondly, the Debye temperature of the metal must be low enough, below 350 K. Thirdly, the necessary condition for observing hydrogen tunneling is a correct choice of methods for measuring hydrogen diffusion coefficients. If the hydrogen diffusion coefficient according to the classical migration mechanism is about 10–11 m<sup>2</sup>/s or higher in the Debye temperature range, it is expedient to use indirect methods based on the Gorsky effect or on measuring the spin lattice relaxation rate via nuclear magnetic resonance (NMR). At lower values of the classical diffusion coefficient in the Debye temperature range of metals, to observe quantum diffusion, it is necessary to use the technique of direct online nuclear reaction analysis (NRAOL) alone or in combination with nuclear reaction analysis (NRA).

**Keywords:** hydrogen, metals, tunneling, observation criteria, equilibrium positions, Debye temperature, quantum diffusion, experimental techniques

### Acknowledgment

*The research was carried out under the state assignment from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme Function, No. 122021000035-6).*

### References

1. Fang, W., Richardson, J.O., Chen, J., Li, X.-Z., and Michaelides, A. Simultaneous deep tunneling and classical hopping for hydrogen diffusion on metals. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 119, 126001. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.126001.
2. Emin, D., Baskes, M.I., and Wilson, W.D. Small-polaronic diffusion of light interstitials in bcc metals. *Phys. Rev. Lett.*, 1979, 42, 791–794. DOI: 10.1103/PhysRevLett.42.791.
3. Schober, H.R. and Stoneham, A.M. Diffusion of hydrogen in niobium. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, 60, 2307–2310. DOI: 10.1103/PhysRevLett.60.2307.
4. Sundell, P.G. and Wahnström, G. Activation energies for quantum diffusion of hydrogen in metals and on metal surfaces using delocalized nuclei within the density-functional theory. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92 (15), 155901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.155901.
5. Di Stefano, D., Mrovec, M., and Elsässer, C. First-principles investigation of quantum mechanical effects on the diffusion of hydrogen in iron and nickel. *Phys. Rev. B*, 2015, 92 (22), 224301. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.224301.

6. Kimizuka, H., Ogata, S., and Shiga, M. Mechanism of fast lattice diffusion of hydrogen in palladium: interplay of quantum fluctuations and lattice strain. *Phys. Rev. B*, 2018, 97, 014102. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.014102.
7. Schober, H.R. and Stoneham, A.M. Diffusion of hydrogen in transition metals. *J. Less-Common Metals*, 1991, 172–174, 538–547. DOI: 10.1016/0022-5088(91)90174-3.
8. Stoneham, A.M. Non-classical diffusion procession. *J. Nucl. Mater.*, 1978, 69–70, 109–116. DOI: 10.1016/0022-3115(78)90239-8.
9. Kimizuka, H., Ogata, S., and Shiga, M. Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects. *Phys. Rev. B*, 2019, 100, 024104. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.024104.
10. Kimizuka, H., Mori, H., and Ogata, S. Effect of temperature on fast hydrogen diffusion in iron: a path-integral quantum dynamics approach. *Phys. Rev. B*, 2011, 83, 094110. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.094110.
11. Yoshikawa, T., Takayanagi, T., Kimizuka, H., and Shiga, M. Quantum–thermal crossover of hydrogen and tritium diffusion in  $\alpha$ -iron. *J. Phys. Chem. C*, 2012, 116, 23113–23119. DOI: 10.1021/jp307660e.
12. Kashlev, Yu.A. Three regimes of diffusion migration of hydrogen atoms in metals. *Theor. Math. Phys.*, 2005, 145, 1590–1603. DOI: 10.1007/s11232-005-0185-8.
13. Qi, Z., Volkl, J., Lasser, R., and Wenzl, H. Tritium diffusion in V, Nb and Ta. *J. Phys. F: Met. Phys.*, 1983, 13, 2053–2062. DOI: 10.1088/0305-4608/13/10/015.
14. Flynn, C.P. and Stoneham, A.M. Quantum theory of diffusion with application to light interstitials in metals. *Phys. Rev. B*, 1970, 1, 3966–3978. DOI: 10.1103/PhysRevB.1.3966.
15. Johnson, D.F. and Carter, E.A. Hydrogen in tungsten: absorption, diffusion, vacancy trapping, and decohesion. *J. Mater. Res.*, 2010, 25, 315–327. DOI: 10.1557/jmr.2010.0036.
16. Jiang, D.E. and Carter, E.A. Diffusion of interstitial hydrogen into and through bcc Fe from first principles. *Phys. Rev. B*, 2004, 70, 064102. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.064102.
17. Vykhodets, V., Nefedova, O., Kurennykh, T., Obukhov, S., and Vykhodets, Ye. Quantum diffusion of deuterium in sodium. *J. Phys. Chem. A*, 2019, 123, 7536–7539. DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06231.
18. Vykhodets, V., Nefedova, O., Kurennykh, T., Obukhov, S., and Vykhodets, E. Debye temperature and quantum diffusion of hydrogen in body-centered cubic metals. *ACS Omega*, 2022, 7 (10), 8385–8390. DOI: 10.1021/acsomega.1c05902.
19. Vykhodets, V., Nefedova, O., Kurennykh, T., and Vykhodets, E. First observation of quantum diffusion in non-cubic metal: deuterium diffusion in In. *Metals*, 2023, 13, 394–405. DOI: 10.3390/met13020394.
20. Vykhodets, V., Nefedova, O., Kurennykh, T., and Danilov, S. Strong increase of tunneling rate of hydrogen in Indium in the presence of vacancies. *J. Phys. Chem. C*, 2024, 128 (6), 2730–2736. DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08044.
21. Hagi, H. Diffusion coefficient of hydrogen in iron without trapping by dislocations and impurities. *Mater. Trans. JIM*, 1994, 35, 112–117. DOI: 10.2320/matertrans1989.35.112.
22. Bryan, W.L. and Dodge, B.F. Diffusivity of hydrogen in pure iron. *AICHE J.*, 1963, 9, 223–228. DOI: 10.1002/aic.690090217.
23. Nagano, M., Hayashi, Y., Ohtani, N., Isshiki, M., and Igaki, K. Hydrogen diffusivity in high purity alpha iron. *Scripta Metallurgica*, 1982, 16, 973–976. DOI: 10.1016/0036-9748(82)90136-3.
24. Messer, R., Blessing, A., Dais, S., Höpfel, D., Majer, G., Schmidt, C., Seeger, A., Zag, W., and Lässer, R. Nuclear magnetic resonance studies of hydrogen diffusion, trapping, and site occupation in metals. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 1986, 1986 (s2), 61–119. DOI: 10.1524/zpch.1986.1986.Suppl\_2.061.
25. Peterson, D.T. and Hammerberg, C.C. Diffusion of hydrogen in barium metal. *J. Less. Com. Met.*, 1968, 16 (4), 457–460. DOI: 10.1016/0022-5088(68)90144-6.







Подана в журнал: 22.06.2024  
УДК 544.6:544.16:517.958  
DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.024-034

## КРИТЕРИИ ДЛЯ НАБЛЮДЕНИЯ ТУННЕЛИРОВАНИЯ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛАХ

В. Б. Выходец<sup>a</sup>, Т. Е. Куренных<sup>b, \*</sup>

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,  
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620137, Россия*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9522-9147>  [vykhod@imp.uran.ru](mailto:vykhod@imp.uran.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9859-3374>  [kurennykh@imp.uran.ru](mailto:kurennykh@imp.uran.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [kurennykh@imp.uran.ru](mailto:kurennykh@imp.uran.ru)  
Адрес для переписки: ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108, Россия  
Тел.: +7 (343) 378-38-46

В работе на основе анализа результатов теоретических и экспериментальных исследований сформулированы критерии, которым должны удовлетворять металлы для наблюдения в них туннелирования водорода, и методики измерения коэффициентов квантовой диффузии. Во-первых, должно быть достаточно малым (на уровне 0,15 нм) расстояние между ближайшими равновесными позициями атомов водорода в кристаллической решетке металла. Во-вторых, должна быть достаточно низкой температура Дебая металла, ниже 350 К. В-третьих, необходимым условием наблюдения туннелирования водорода является корректный выбор методики измерения коэффициентов диффузии водорода. Если в районе температуры Дебая коэффициент диффузии водорода по классическому механизму миграции находится на уровне 10–11 м<sup>2</sup>/с и выше, то целесообразно применять непрямые методики, основанные на эффекте Горского или измерении скорости спин-решеточной релаксации с помощью ядерного магнитного резонанса. При более низких значениях коэффициента классической диффузии в районе температуры Дебая металла для наблюдения квантовой диффузии необходимо применять прямую методику ядерных реакций в режиме онлайн или ее же в сочетании с методом ядерных реакций.

**Ключевые слова:** водород, металлы, туннелирование, критерии наблюдения, равновесные позиции, температура Дебая, квантовая диффузия, экспериментальные методики

### 1. Введение

В настоящее время считается, что существует два механизма миграции атомов в твердых телах: классический (надбарьерные прыжки) и квантовый (туннелирование). Оба механизма реализуются одновременно при любых температурах, но почти всегда скорость классической диффузии гораздо больше квантовой, и только в редких случаях квантовая доминирует. Благодаря этому и был экспериментально исследован массоперенос по механизму туннелирования. Как следствие, данные по квантовой диффузии малочисленны, и она экспериментально слабо изучена. Наблюдение туннелирования во всех случаях базировалось на регистрации перегибов на температурных зависимостях коэффициентов диффузии  $D(T)$  в координатах  $\log D - 1/T$ . Перегибы являются следствием конкуренции двух механизмов миграции атомов, ниже температуры перегиба  $T_b$  доминирует массоперенос по квантовому механизму миграции, а выше – по классическому. Малое число опытных данных по квантовой диффузии в первую очередь является следствием фундаментальных закономерностей квантовой механики для туннелирования. Этим объясняется, в частности, наблюдение туннелирования при диффузии только водорода – самого легкого элемента. Поскольку водород участвует во многих природных и технологиче-

ских процессах, работы по диффузии водорода составляют значительную часть диффузионных исследований и представляют интерес для материаловедения, квантовой химии, теорий диффузии, низкотемпературных технологий, астрофизики и других отраслей науки и техники [1–6]. Целью настоящей работы является формирование критериев, с помощью которых могут быть определены условия, необходимые для наблюдения квантовой диффузии водорода в твердых телах. Акцент при этом будет сделан конкретно на металлах, поскольку для других типов твердых тел опытные данные по квантовой диффузии водорода отсутствуют. Ранее вопрос о критериях, необходимых для наблюдения туннелирования, неоднократно обсуждался в литературе [7], и актуальность его рассмотрения в данной работе обусловлена появлением новых результатов. В работе будут проанализированы теоретические данные по этому вопросу, требования к характеристикам методик для измерения коэффициентов диффузии водорода, влияние температурных интервалов исследований на возможность наблюдения туннелирования и эмпирические закономерности, установленные в работах, в которых были получены или, напротив, не получены результаты по квантовой диффузии.

## 2. Теоретические результаты

Для теоретического описания квантовой диффузии водорода в металлах применено несколько подходов: концепция поляронов малого радиуса Флина и Стоунхэма [2, 4, 5, 7, 8], путь-интегральная молекулярно-динамическая модель Фейнмана [9, 10], теория функционала плотности [4, 5, 9], полуклассическая теория переходного состояния [5], центроидная и кольцевая полимерная молекулярная динамика [11], неравновесная статистическая термодинамика [12] и другие. В перечисленных теоретических работах рассматривали квантовую диффузию водорода в металлах с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой, и впервые туннелирование водорода наблюдали около 50 лет назад [13] также в ОЦК-металлах. Объяснение перегибов на зависимостях  $D(T)$  в ОЦК-металлах было несомненным успехом теорий. Для протия в Nb и Ta это было сделано даже на количественном уровне [4, 7, 12]. Тем не менее в теоретических работах отсутствуют жесткие критерии, согласно которым обязательным условием наблюдения туннелирования водорода является указанный тип кристаллической решетки матрицы. Основная роль в теориях отводилась расстоянию между ближайшими равновесными позициями междоузельных атомов в кристаллической решетке. Отметим в связи с этим работу [7], в которой был сделан прогноз о возможности наблюдения туннелирования водорода в Lu, имеющем гексагональную плотноупакованную (ГПУ) решетку. В ней учет квантовых эффектов при диффузии выполнен в модели полярона малого радиуса [14], вероятность перехода атома водорода между ближайшими равновесными позициями в решетке была найдена с использованием выражения золотого правила Ферми для скоростей квантовых переходов, а для физики фононов применена аппроксимация Борна – Оппенгеймера. В более поздних работах [4, 15, 16] были использованы другие, более современные модели, и в них получил подтверждение основной результат работы [7], согласно которому необходимым условием для наблюдения перегиба на зависимости  $D(T)$  является достаточно малое, примерно 0,15 нм, расстояние между ближайшими равновесными позициями атомов водорода в решетке. Именно при столь малом расстоянии оказывалась достаточно высокой для экспериментального наблюдения вероятность туннельных переходов между ближайшими равновесными позициями атомов водорода, т. е. элементарного акта диффузии с помощью квантового механизма миграции. Это теоретическое заключение, учитывающее квантово-механическую природу процесса, вряд ли может быть подвергнуто ревизии, однако прогноз авторов работы [7] о возможности наблюдения туннелирования водорода в Lu оказался ошибочным. Это свидетельствует о том, что критерий достаточно малого расстояния между ближайшими равновесными позициями является необходимым, но не достаточным, и ошибочность упомянутого прогноза в теоретических работах обусловлена тем, что в них не были приняты во внимание другие обстоятельства, влияющие на возможность наблюдения квантовой диффузии.

### 3. Влияние температурного интервала исследований на возможность наблюдения туннелирования

В теоретических работах фигурировали различные точки зрения на влияние температурного интервала исследований на возможность наблюдения туннелирования водорода в металлах. В моделях, основанных на центроидной и кольцевой полимерной динамике [11], эти вопросы вообще не связаны друг с другом. Напротив, в работе [12], использующей положения неравновесной статистической термодинамики, показано, что перегиб на температурной зависимости коэффициентов диффузии водорода, обусловленный переходом к туннельному механизму миграции, должен иметь место в районе температуры Дебая матрицы  $\theta_D$ . Из общих соображений также можно было предполагать, что коэффициент диффузии водорода относится к свойствам, для которых температура Дебая приближенно будет границей между квантовым и классическим поведением системы, как это имеет место для некоторых других свойств, которые зависят от спектров колебаний атомов, например для теплоемкости.

На рис. 1 представлены все полученные к настоящему времени экспериментальные данные по диффузии изотопов водорода в металлах, в которых наблюдались перегибы на температурной зависимости коэффициентов диффузии, связанные с переходом от классической диффузии к квантовой. Всего известно пять таких систем, и из рис. 1 видно, что в этих случаях можно говорить не только о том, что перегиб имеет место в районе температуры Дебая матрицы, но даже о практическом равенстве температур Дебая  $\theta_D$  и перегиба  $T_b$  на температурной зависимости коэффициентов диффузии. Для систем Nb–H, Ta–H, Na–D, In–D и K–D значения температур перегиба равны 250, 229, 160, 125 и 120 К, а температуры Дебая металлов – 260, 225, 155, 129 и 100 К соответственно. При этом погрешность в определении температур перегиба была не менее 10 К, и температуры Дебая известны примерно с такой же точностью, они зависят от методик их измерения.

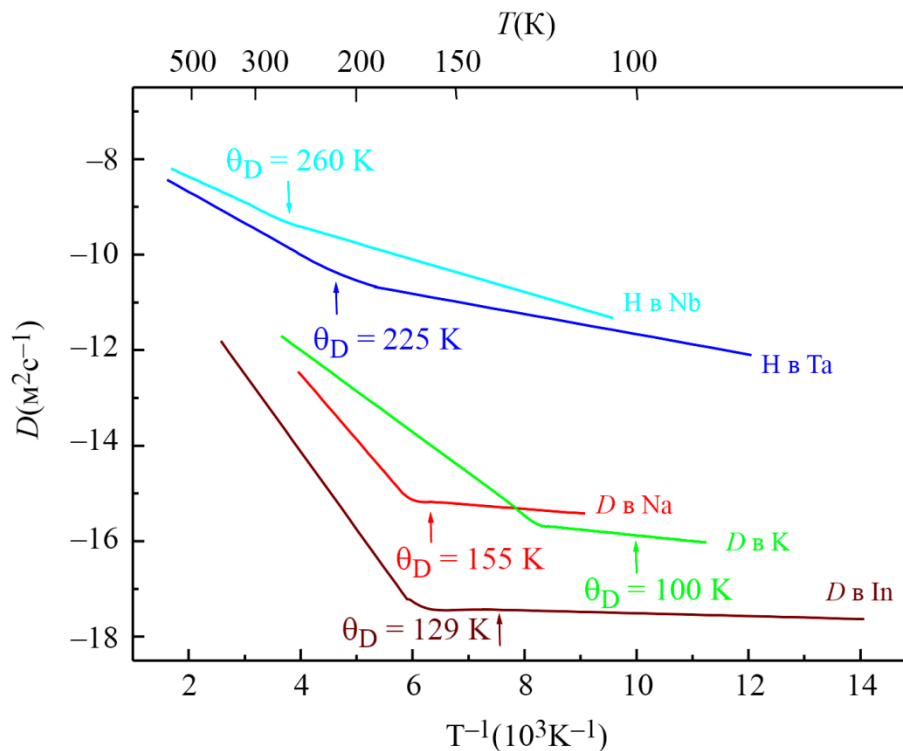


Рис. 1. Температурные зависимости коэффициентов диффузии  $D$  против  $T^{-1}$  в Nb и Ta [13] и дейтерия в Na [17], K [18] и In [19, 20]: стрелками показаны значения температур Дебая  $\theta_D$  металлов

Из рис. 1 видно, что с температурой Дебая матрицы связан не только сам перегиб энергии активации диффузии, но и величина перегиба. Это иллюстрирует рис. 2, на котором величина перегиба характеризуется с помощью параметра  $\Delta Q/Q$ , где  $Q$  – энергия активации диффузии для температур  $T > T_b$ , а  $\Delta Q$  – изменение энергии активации при перегибе. На рис. 2 учтены все опубликованные данные по квантовой диффузии водорода в металлах, а также результаты по диффузии трех изотопов водорода в V [14] и протия в  $\alpha$ -Fe [21–23], в которых перегиб на температурной зависимости  $D(T)$  не наблюдали. Кроме того, на рис. 2 в качестве прогноза приведены несколько данных по  $\Delta Q/Q$  для систем, для которых либо вообще отсутствуют экспериментальные данные по диффузии изотопов водорода, либо они проводились для температурных интервалов, не включающих температуры Дебая.

Из рис. 2 видно, что для металлов с  $\theta_D < 160$  К значения  $\Delta Q/Q$  близки к 1, т. е. наблюдается очень сильный перегиб. При увеличении  $\theta_D$  выше 160 К значения  $\Delta Q/Q$  плавно уменьшаются, и при существующей точности диффузионного эксперимента перегибы на зависимостях  $D(T)$  можно зарегистрировать только для металлов, у которых  $T < 350$  К. Эта зависимость может быть важной и, не исключено, основной причиной сильной ограниченности опытных данных по туннелированию водорода в металлах. Другими словами, малое число опытных данных по туннелированию в значительной мере обусловлено высокими значениями температур Дебая у многих металлов – металлов с достаточно малым расстоянием между ближайшими равновесными позициями атомов водорода в решетке. Таковыми являются металлы с ОЦК-решеткой, а также In, имеющий объемно-центрированную тетрагональную решетку [19]. Отметим, что представленный на рис. 2 результат по зависимости  $\frac{\Delta Q}{Q}(\theta_D)$  является эмпирическим, и он пока не имеет теоретического обоснования. На рис. 2 не приняты во внимание данные по диффузии изотопов водорода в системах Nb–D, Nb–T, Ta–D и Ta–T [13], они выпадают из общей закономерности. В этих системах в отличие от Nb–H и Ta–H не было зарегистрировано перегиба на зависимостях  $D(T)$ .

Кардинальное отличие квантовых свойств систем Nb–D, Nb–T, Ta–D и Ta–T от таковых для Nb–H и Ta–H может быть обусловлено отличающимися в них траекториями различных изотопов водорода при диффузии в ОЦК-решетке. Следует ожидать, что в системах с перегибами равновесными позициями атомов водорода являются тетраэдрические междоузлия, а без перегибов – октаэдрические. Эта гипотеза основана на следующих соображениях. Расстояния между ближайшими тетраэдрическими междоузлиями в ОЦК-решетке примерно в 1,5 раза меньше, чем между октаэдрическими, и этого достаточно, чтобы в двух типах систем на несколько порядков отличались значения туннельных матричных элементов [4], ответственных за вероятность туннелирования атомов. В классическом приближении равновесными позициями атомов водорода в Nb, Ta, W и  $\alpha$ -Fe по результатам DFT расчетов [4, 15, 16] являются тетраэдрические междоузлия, а октаэдрические междоузлия в элементарных актах миграции не участвуют. В то же время в моделях, учитывающих квантовые эффекты, октаэдрические междоузлия будут присутствовать на диффузионных траекториях [10], и в этих случаях перегибы на зависимостях  $D(T)$  будут отсутствовать из-за низкой вероятности туннелирования атомов водорода между равновесными позициями.

В качестве прогноза на рис. 2 показано, что в W, Mo и Cr не будут наблюдаться перегибы на зависимостях  $D(T)$  и, соответственно, не будут получены экспериментальные данные по диффузии водорода с помощью механизма туннелирования. Это обусловлено следующими соображениями. С одной стороны, эти металлы имеют ОЦК-решетку, для которой в литературе получены почти все результаты по туннелированию изотопов водорода. Однако, с другой стороны, из эмпирической зависимости  $\frac{\Delta Q}{Q}(\theta_D)$  следует, что туннелирование водорода в этих металлах не будет наблюдаться из-за высоких значений температур Дебая. Мы привели на рис. 2 расчетные данные по  $\Delta Q/Q$  для V, W, Mo и Cr, поскольку это технически важные материалы, широко применяющиеся в низкотемпературных технологиях. По нашим

оценкам, для них не следует ожидать при криогенных температурах повышенных значений коэффициентов диффузии водорода в сравнении с классическими моделями.

Кандидатами на наблюдение квантовой диффузии водорода в металлах в соответствии с изложенными выше результатами являются Ba, Eu, Rb и Cs. На рис. 2 в качестве прогноза показаны данные по  $\Delta Q/Q$  для них. При этом мы исходили из того, что все эти 4 металла имеют ОЦК-решетку и низкую температуру Дебая. Она примерно равна 120 К для Ba и Eu, 56 К для Cs и 40 К для Rb. Вопрос о возможности получения таких экспериментальных результатов для Ba, Eu, Rb и Cs будет рассмотрен в разделе 4.

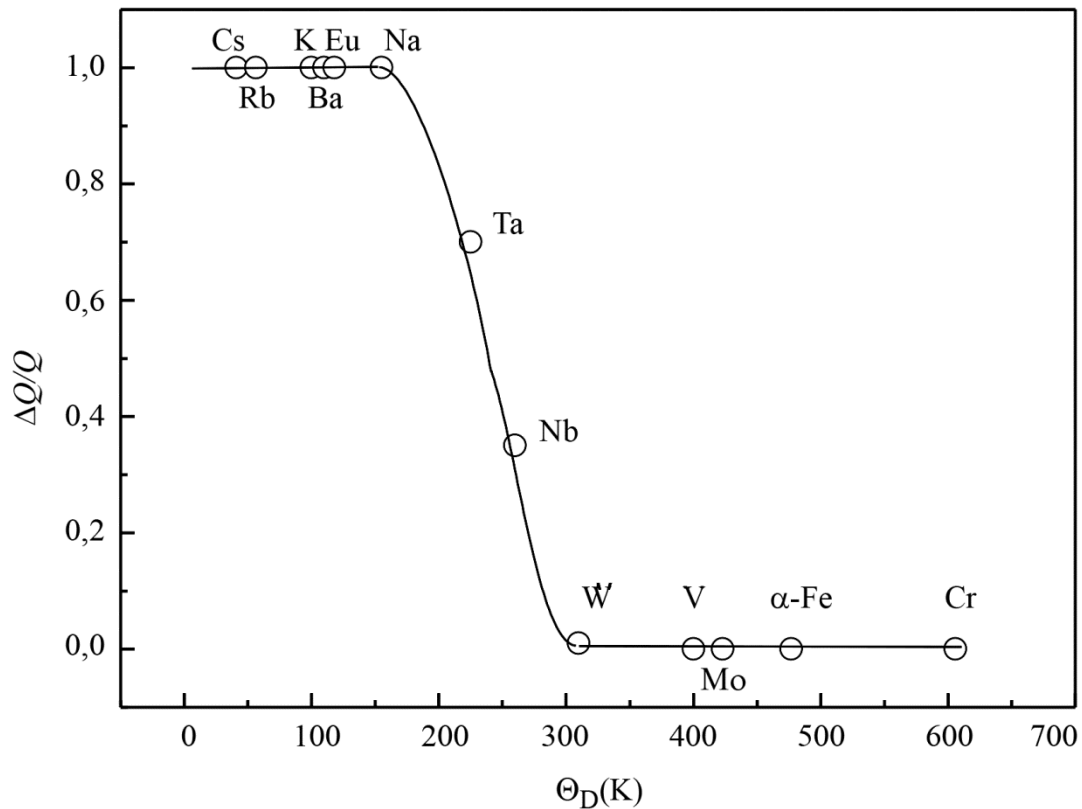


Рис. 2. Зависимость величины перегиба энергии активации диффузии  $\Delta Q/Q$  от температуры Дебая  $\Theta_D$  металла: кружки – экспериментальные данные для дейтерия в K [18], In [19] и Na [17], протия в Ta [13], Nb [13] и  $\alpha$ -Fe [21–23] и протия, дейтерия и трития в V [13]; треугольники – расчетные данные для изотопов водорода в Ba, Eu, Rb, Cs, W, Mo и Cr

#### 4. Влияние характеристик методик на возможность наблюдения туннелирования водорода

Все наблюдения квантовой диффузии водорода в металлах имели место при низких (по диффузионным масштабам) температурах, от 90 до 250 К. Для измерения коэффициентов диффузии при низких и криогенных температурах применяли три метода: два не прямых, основанных на эффекте Горского [13] и измерении скорости спин-решеточной релаксации с помощью ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [24], и прямые методы ядерных реакций (NRA) и ядерных реакций в режиме онлайн (NRAOL) [20], использующие диффузионные уравнения Фика. Нижний предел измеряемых значений  $D$  для NRAOL при совместном применении с NRA составляет около  $10^{-18}$  м<sup>2</sup>/с, а верхний –  $10^{-12}$  м<sup>2</sup>/с [20]. С помощью двух не прямых методов измерения  $D$  проводили для интервала от  $10^{-8}$  до  $10^{-13}$  м<sup>2</sup>/с [13, 24]. Видно, что прямой и не прямые методы существенно различаются по интервалам измеряемых значений коэффициентов диффузии, и поэтому для некоторых металлов целесообразно использовать только не прямые методы, а для других – прямые. Кроме того, имеются и другие особен-



ности рассматриваемых методик, которые необходимо учитывать при постановке экспериментальных исследований. NRAOL является ускорительной методикой, основанной на использовании реакции  ${}^2\text{H}(d,p){}^3\text{H}$  на ядрах дейтерия, поэтому она применима для исследования диффузии только одного изотопа водорода – дейтерия. Это является недостатком ядерно-физической методики, и непрямые методики превосходят ее по изотопной чувствительности. Например, исследования диффузии в V, Nb и Ta с помощью эффекта Горского были проведены для всех трех изотопов водорода [13]. Эта особенность методики Горского может иметь важное значение, поскольку исследования изотопного эффекта при туннелировании могут быть также использованы для идентификации механизма миграции атомов [12], классического или квантового. Таким образом, можно констатировать, что существующие методики для измерения коэффициентов диффузии водорода при низких и криогенных температурах имеют ограниченные области применения либо по металлам, либо по изотопам водорода.

Наибольшие перспективы в исследовании квантовой диффузии водорода в металлах в настоящее время связаны с применением методики NRAOL. При ее использовании образец размещается в вакуумной камере ускорительной установки, осуществляется его непрерывное облучение дейтронами, и при их имплантации происходит формирование в образце внутреннего источника диффузии атомов дейтерия. Одновременно в камере ускорительной установки проводится изотермический диффузионный отжиг образца, в том числе при криогенных температурах, и измерение с помощью ядерной реакции  ${}^2\text{H}(d,p){}^3\text{H}$  концентрационных профилей  $c(x,t)$ , где  $c$  – концентрация дейтерия на глубине  $x$  в образце при времени  $t$  диффузионного отжига. Значения  $D$  при применении NRAOL, как и других прямых методов, находят при математической обработке профилей  $c(x,t)$ . Особенности NRAOL являются одновременное формирование источника диффузии и диффузионной зоны, а также использование облучения на ускорителе для двух целей: создания источника диффузии и измерения профилей  $c(x,t)$ . Они обусловили применимость NRAOL для низкотемпературных исследований, для металлов, которым противопоказан отжиг в водородсодержащих средах при диффузионных исследованиях из-за их разрушения, а также для материалов, которые не растворяют водород. В итоге практически универсальный характер методики NRAOL при измерении коэффициентов диффузии дейтерия ограничен только одним объектом исследований – литием и материалами с его высокими концентрациями. Это обусловлено тем, что при взаимодействии ядер лития с ускоренными дейтронами протекают ядерные реакции, которые конкурируют с реакцией  ${}^2\text{H}(d,p){}^3\text{H}$ . При этом выход от конкурирующих реакций превосходит таковой от реакции на имплантированном дейтерии.

При выборе методики для исследования квантовой диффузии водорода наиболее простым является вариант, при котором для объекта исследований имеются данные по диффузии водорода по классическому механизму атомных прыжков. В этом случае с помощью экстраполяции по уравнению Аррениуса можно оценить значение коэффициента диффузии при температуре Дебая металла и на этом основании определить методику, которую целесообразно использовать при исследовании туннелирования в данном металле. При этом также нужно учитывать значения температуры Дебая  $\theta_D$  металла и расстояния между ближайшими равновесными позициями атомов в кристаллической решетке, которые определяют возможность наблюдения квантовой диффузии. Эту процедуру можно проиллюстрировать на примере Ва. Во-первых, он имеет ОЦК-решетку, поэтому для него можно ожидать, что расстояние между ближайшими равновесными позициями будут достаточно малыми для наблюдения туннелирования. Во-вторых, у Ва достаточно низкая температура Дебая – около 120 К. Наконец, для Ва имеются результаты по диффузии водорода в интервале от 200 до 600 °С [25], что позволяет оценить с помощью экстраполяции значение коэффициента диффузии водорода при температуре Дебая. При реализации такой процедуры было установлено, что для исследования квантовой диффузии дейтерия в Ва будет целесообразно применять методику NRAOL. Для многих металлов условия для применения такой процедуры отсутствуют. Это имеет место, в частности, для Eu, Cs и Rb, прогноз для которых по  $\Delta Q/Q$  представлен на рис. 2.

С одной стороны, эти металлы имеют достаточно низкую температуру Дебая и ОЦК-решетку, что благоприятствует наблюдению туннелированию водорода, но для них отсутствуют какие-либо данные, с помощью которых можно было бы оценить значения коэффициентов диффузии водорода при температурах Дебая. Еще более сложной является ситуация с Cs и Rb, которые также имеют ОЦК-решетку и низкие температуры Дебая. Для этих металлов значения  $\theta_D$  составляют, соответственно, 56 и 40 К. Поскольку при столь низких температурах диффузионные исследования водорода в металлах ранее не проводились, в этих случаях нет возможности отдать предпочтение той или иной методике исследования туннелирования водорода.

## 5. Заключение

Туннелирование, наряду с надбарьерными прыжками атомов, является одним из двух существующих механизмов миграции атомов в твердых телах. В то же время имеет место парадоксальная ситуация: для этого формально самостоятельного механизма миграции опытные данные по квантовой диффузии получены только для изотопов водорода в пяти металлах. В этой работе на основе анализа результатов теоретических и экспериментальных исследований сформулированы критерии, которым должны удовлетворять металлы для наблюдения в них туннелирования водорода, и методики измерения коэффициентов квантовой диффузии. Во-первых, должно быть достаточно малым (на уровне 0,15 нм) расстояние между ближайшими равновесными позициями атомов водорода в кристаллической решетке металла. Этому условию удовлетворяют большинство металлов, имеющих ОЦК- или ОЦТ-решетки. В то же время не исключены и реально имеются случаи, когда у различных изотопов водорода в ОЦК-металлах будут отличаться диффузионные траектории атомов водорода. Как следствие, для некоторых изотопов водорода не будет наблюдаться квантовая диффузия в ОЦК-металлах. Во-вторых, условием наблюдения туннелирования является достаточно низкая температура Дебая металла, ниже 350 К. Наконец, необходимым условием наблюдения туннелирования водорода является корректный выбор методики измерения коэффициентов диффузии водорода. Если в районе температуры Дебая коэффициент диффузии водорода по классическому механизму миграции находится на уровне  $10^{-11}$  м<sup>2</sup>/с и выше, то целесообразно применять непрямые методики, основанные на эффекте Горского или измерении скорости спин-решеточной релаксации с помощью ЯМР. При более низких значениях коэффициента классической диффузии в районе температуры Дебая металла для наблюдения квантовой диффузии необходимо применять прямую методику NRAOL или ее же в сочетании с NRA.

## Благодарность

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция», № 122021000035-6).*

## Литература

1. Simultaneous deep tunneling and classical hopping for hydrogen diffusion on metals / W. Fang, J. O. Richardson, J. Chen, X.-Z. Li, A. Michaelides // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 119. – P. 126001. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.126001.
2. Small-polaronic diffusion of light interstitials in bcc metals / D. Emin, M. I. Baskes, W. D. Wilson // Phys. Rev. Lett. – 1979. – Vol. 42. – P. 791–794. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.42.791.
3. Schober H. R., Stoneham A. M. Diffusion of hydrogen in niobium // Phys. Rev. Lett. – 1988. – Vol. 60. – P. 2307–2310. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.60.2307.



4. Sundell P. G., Wahnström G. Activation energies for quantum diffusion of hydrogen in metals and on metal surfaces using delocalized nuclei within the density-functional theory // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92 (15). – P. 155901. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.92.155901.
5. Di Stefano D., Mrovec M., Elsässer C. First-principles investigation of quantum mechanical effects on the diffusion of hydrogen in iron and nickel // *Phys. Rev. B.* – 2015. – Vol. 92 (22). – P. 224301. – DOI: 10.1103/PhysRevB.92.224301.
6. Kimizuka H., Ogata S., Shiga M. Mechanism of fast lattice diffusion of hydrogen in palladium: Interplay of quantum fluctuations and lattice strain // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97. – P. 014102. – DOI: 10.1103/PhysRevB.97.014102.
7. Schober H. R., Stoneham A. M. Diffusion of hydrogen in transition metals // *J. Less-Common Metals.* – 1991. – Vol. 172–174. – P. 538–547. – DOI: 10.1016/0022-5088(91)90174-3.
8. Stoneham A. M. Non-classical diffusion procession // *J. Nucl. Mater.* – 1978. – Vols. 69–70. – P. 109–116. – DOI: 10.1016/0022-3115(78)90239-8.
9. Kimizuka H., Ogata S., Shiga M. Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects // *Phys. Rev. B.* – 2019. – Vol. 100. – P. 024104. – DOI: 10.1103/PhysRevB.100.024104.
10. Kimizuka H., Mori H., Ogata S. Effect of temperature on fast hydrogen diffusion in iron: A path-integral quantum dynamics approach // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 83. – P. 094110. – DOI: 10.1103/PhysRevB.83.094110.
11. Quantum–thermal crossover of hydrogen and tritium diffusion in  $\alpha$ -iron / T. Yoshikawa, T. Takayanagi, H. Kimizuka, M. Shiga // *J. Phys. Chem. C.* – 2012. – Vol. 116. – P. 23113–23119. – DOI: 10.1021/jp307660e.
12. Kashlev Ya. A. Three regimes of diffusion migration of hydrogen atoms in metals // *Theor. Math. Phys.* – 2005. – Vol. 145. – P. 1590–1603. – DOI: 10.1007/s11232-005-0185-8.
13. Tritium diffusion in V, Nb and Ta / Z. Qi, J. Volkl, R. Lasser, H. Wenzl // *J. Phys. F: Met. Phys.* – 1983. – Vol. 13. – P. 2053–2062. – DOI: 10.1088/0305-4608/13/10/015.
14. Flynn C. P., Stoneham A. M. Quantum theory of diffusion with application to light interstitials in metals // *Phys. Rev. B.* – 1970. – Vol. 1. – P. 3966–3978. – DOI: 10.1103/PhysRevB.1.3966.
15. Johnson D. F., Carter E. A. Hydrogen in tungsten: absorption, diffusion, vacancy trapping, and decohesion // *J. Mater. Res.* – 2010. – Vol. 25. – P. 315–327. – DOI: 10.1557/jmr.2010.0036.
16. Jiang D. E., Carter E. A. Diffusion of interstitial hydrogen into and through bcc Fe from first principles // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 70. – P. 064102. – DOI: 10.1103/PhysRevB.70.064102.
17. Quantum diffusion of deuterium in sodium / V. Vykhodets, O. Nefedova, T. Kurennykh, S. Obukhov, Ye. Vykhodets // *J. Phys. Chem. A.* – 2019. – Vol. 123. – P. 7536–7539. – DOI: 10.1021/acs.jpca.9b06231.
18. Debye temperature and quantum diffusion of hydrogen in body-centered cubic metals / V. Vykhodets, O. Nefedova, T. Kurennykh, S. Obukhov, E. Vykhodets // *ACS Omega.* – 2022. – Vol. 7 (10). – P. 8385–8390. – DOI: 10.1021/acsomega.1c05902.
19. First observation of quantum diffusion in non-cubic metal: deuterium diffusion in In / V. Vykhodets, O. Nefedova, T. Kurennykh, E. Vykhodets // *Metals.* – 2023. – Vol. 13. – P. 394–405. – DOI: 10.3390/met13020394.
20. Strong increase of tunneling rate of hydrogen in Indium in the presence of vacancies / V. Vykhodets, O. Nefedova, T. Kurennykh, S. Danilov // *J. Phys. Chem. C.* – 2024. – Vol. 128 (6). – P. 2730–2736. – DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08044.
21. Hagi H. Diffusion coefficient of hydrogen in iron without trapping by dislocations and impurities // *Mater. Trans. JIM.* – 1994. – Vol. 35. – P. 112–117. – DOI: 10.2320/matertrans1989.35.112.
22. Bryan W. L., Dodge B. F. Diffusivity of hydrogen in pure iron // *AIChE J.* – 1963. – Vol. 9. – P. 223–28. – DOI: 10.1002/aic.690090217.
23. Hydrogen diffusivity in high purity alpha iron / M. Nagano, Y. Hayashi, N. Ohtani, M. Ishiki, K. Igaki // *Scripta Metallurgica.* – 1982. – Vol. 16. – P. 973–976. – DOI: 10.1016/0036-9748(82)90136-3.

24. Nuclear magnetic resonance studies of hydrogen diffusion, trapping, and site occupation in metals / R. Messer, A. Blessing, S. Dais, D. Höpfel, G. Majer, C. Schmidt, A. Seeger, W. Zag, R. Lässer // Zeitschrift für Physikalische Chemie. – 1986. – 1986 (s2). – P. 61–119. – DOI: 10.1524/zpch.1986.1986.Suppl\_2.061.
25. Peterson D. T., Hammerberg C. C. Diffusion of hydrogen in barium metal // J. Less. Com. Met. – 1968. – Vol. 16. – P. 457–460. – DOI: 10.1016/0022-5088(68)90144-6.

**Received:** 27.04.2024

**Revised:** 05.06.2024



**Accepted:** 16.08.2024



**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.4.035-046



## AN EQUIVALENT MODEL FOR MICROMAGNETIC SIMULATION OF THE MAGNETIZATION OF FERRIMAGNETIC STRUCTURES



S. V. Batalov<sup>a</sup>, V. D. Bessonov<sup>b</sup>, V. S. Teplov<sup>c</sup>\*, and A. V. Telegin<sup>d</sup>

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620108, Russia*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2036-2888>  [svbatalov@gmail.com](mailto:svbatalov@gmail.com);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7837-4366>  [bessonov.v.d@gmail.com](mailto:bessonov.v.d@gmail.com);

<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3986-4768>  [teplov.imp@mail.ru](mailto:teplov.imp@mail.ru);

<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7209-4307>  [telegin@imp.uran.ru](mailto:telegin@imp.uran.ru)

\*Corresponding author. Email: [teplov.imp@mail.ru](mailto:teplov.imp@mail.ru)

Address for correspondence: ul. S. Kovalevskoy, 18, Ekaterinburg, 620108, Russia  
Tel.: +7 (343) 378-3743

A model for micromagnetic simulation of the magnetization of a ferrimagnetic film consisting of an alloy of ferromagnetic and rare-earth metals is proposed and discussed. It is shown that the model qualitatively replicates the experimentally observed temperature dependencies of the saturation magnetization of various ferrimagnetic alloys for different percentages of the rare-earth element and that it exhibits a similar magnetic hysteresis loop. The results of the study are of interest for the theoretical analysis of the magnetization behavior of ferromagnetic–heavy-metal film nanostructures, as well as for solving problems of applied materials science and magnetism.

**Keywords:** ferrimagnetic films, micromagnetic simulation, saturation magnetization, magnetic hysteresis, magnetic anisotropy

### Acknowledgment

*The work was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 21-72-20160 (<https://rscf.ru/en/project/21-72-20160>). We appreciate the assistance from the shared research facilities center of the FEFU.*

### Conflict of interests

*The authors declare no conflict of interests.*

### References

1. Stashkevich, A.A. Spin-orbitronics a novel trend in spin oriented electronics. *Journal of the Russian Universities. Radioelectronics*, 2019, 22 (6), 45–54. DOI: 10.32603/1993-8985-2019-22-6-45-54.
2. Ustinov, V.V., Yasyulevich, I.A., and Bebenin, N.G. The chiral spin-orbitronics of a helimagnet–normal metal heterojunction. *Physics of Metals and Metallography*, 2023, 24, 195–204. DOI: 10.1134/S0031918X22601895.
3. Fert, A. and Van Dau, F.N. Spintronics, from giant magnetoresistance to magnetic skyrmions and topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 2019, 20 (7–8), 817–831. DOI: 10.1016/j.crhy.2019.05.020.

4. Tang, J., Kong, L., Wang, W., Du, H., and Tian, M. Lorentz transmission electron microscopy for magnetic skyrmions imaging. *Chinese Physics B*, 2019, 28 (8), 087503. DOI: 10.1088/1674-1056/28/8/087503.
5. Fert, A., Reyren, N., and Cros, V. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. *Nature Reviews Materials*, 2017, 2 (7), 1–15. DOI: 10.1038/natrevmats.2017.31.
6. Ding, J., Yang, X., and Zhu, T. Manipulating current induced motion of magnetic skyrmions in the magnetic nanotrack. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2015, 48 (11), 115004. DOI: 10.1088/0022-3727/48/11/115004.
7. Kang, W., Wu, B., Chen, X., Zhu, D., Wang, Z., Zhang, X., Zhou, Y., Zhang, Y., and Zhao, W. A comparative cross-layer study on racetrack memories: domain wall vs skyrmion. *ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems (JETC)*, 2019, 16 (1), 1–17. DOI: 10.1145/3333336.
8. Song, K.M., Jeong, J.S., Pan, B., Zhang, X., Xia, J., Cha, S., Park, T.-E., Kim, K., Finizio, S., Raabe, J., Chang, J., Zhou, Y., Zhao, W., Kang, W., Ju, H., and Woo, S. Skyrmion-based artificial synapses for neuromorphic computing. *Nature Electronics*, 2020, 3 (3), 148–155. DOI: 10.1038/s41928-020-0385-0.
9. Göbel, B., Mertig, I., and Tretiakov, O.A. Beyond skyrmions: review and perspectives of alternative magnetic quasiparticles. *Physics Reports*, 2021, 895, 1–28. DOI: 10.1016/j.physrep.2020.10.001.
10. Wei, W.S., He, Z.D., Qu, Z., and Du, H.F. Dzyaloshinsky–Moriya interaction (DMI)-induced magnetic skyrmion materials. *Rare Metals*, 2021, 40 (11), 3076–3090. DOI: 10.1007/s12598-021-01746-9.
11. Ma, M., Pan, Z., and Ma, F. Artificial skyrmion in magnetic multilayers. *Journal of Applied Physics*, 2022, 132 (4), 043906. DOI: 10.1063/5.0095875.
12. Leliaert, J. and Mulkers, J. Tomorrow’s micromagnetic simulations. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125 (18), 180901. DOI: 10.1063/1.5093730.
13. Bo, L., Hu, C., Zhao, R., Zhang, X. Micromagnetic manipulation and spin excitation of skyrmionic structures. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2022, 55 (33), 333001. DOI: 10.1088/1361-6463/ac6cb2.
14. Ognev, A.V., Kolesnikov, A.G., Kim, Y.J., Cha, I.H., Sadovnikov, A.V., Nikitov, S.A., Soldatov, I.V., Talapatra, A., Mohanty, J., Mruczkiewicz, M., Ge, Y., Kerber, N., Dittrich, F., Virnau, P., Klaui, M., Kim, Y.K., and Samardak, A.S. Magnetic direct-write skyrmion nanolithography. *ACS Nano*, 2020, 14 (11), 14960–14970. DOI: 10.1021/acsnano.0c04748.
15. Landau, L. and Lifshits, E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability
16. in ferromagnetic bodies. *Phys. Zeitsch. der Sow.*, 1935, 8, 153–169.
17. Gilbert, T.L. A Lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetization field. *Physical Review D*, 1955, 100, 1243.
18. Vansteenkiste, A., Leliaert, J., Dvornik, M., Helsen, M., Garcia-Sanchez, F., and Van Waeyenberge, B. The design and verification of MuMax3. *AIP Advances*, 2014, 4 (10), 107133. DOI: 10.1063/1.4899186.
19. Donahue, M.J. and Porter, D.G. *OOMMF User's Guide*, Version 1.0, 1999. DOI: 10.1002/HTTPS://DX.DOI.ORG/10.6028/NIST.IR.6376.
20. Teplov, V.S., Bessonov, V.D., and Telegin, A.V. Numerical simulation of magnetization in PMA films. *Zhurnal Radioelektroniki*, 2022, 7. (In Russian). DOI: https://doi.org/10.30898/1684-1719.2022.7.3. Available at: [http://jre.cplire.ru/jre/jul22/3/abstract\\_e.html](http://jre.cplire.ru/jre/jul22/3/abstract_e.html)
21. Gubanov, V.A., Kruglyak, V.V., Sadovnikov, A.V. Controlling the modes of spin wave propagation in an yttrium iron garnet waveguide by local laser heating. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2023, 87 (3), 362–366. DOI: 10.3103/S1062873822701246.

22. Teplov, V.S., Bessonov, V.D., Batalov, S.V., and Telegin A.V. 150-degree nonlinear magnetic oscillations in YIG films. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2022, 35 (6), 1389–1395. DOI: 10.1007/s10948-022-06208-6.
23. Ivanov, B.A. Ultrafast spin dynamics and spintronics for ferrimagnets close to the spin compensation point. *Low Temperature Physics*, 2019, 45 (9), 935–963. DOI: 10.1063/1.5121265.
24. Zhang, Y., Feng, X., Zheng, Z., Zhang, Z., Lin, K., Sun, X., Wang, G., Wang, J., Wei, J., Vallobra, P., He, Y., Wang, Z., Chen, L., Zhang, K., Xu, Y., and Zhao, W. Ferrimagnets for spintronic devices: from materials to applications. *Applied J. Physics Reviews*, 2023, 10 (1), 011301. DOI: 10.1063/5.0104618.
25. Kim, S.K., Beach, G.S., Lee, K.J., Ono, T., Rasing, T., and Yang, H. Ferrimagnetic spintronics. *Nature Materials*, 2022, 21 (1), 24–34. DOI: 10.1038/s41563-021-01139-4.
26. Barker, J. and Atxitia, U. A review of modelling in ferrimagnetic spintronics. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2021, 90 (8), 081001. DOI: 10.7566/JPSJ.90.081001.
27. Tanaka, H., Takayama, S., and Fujiwara, T. Electronic-structure calculations for amorphous and crystalline Gd<sub>33</sub>Fe<sub>67</sub> alloys. *Physical Review B*, 1992, 46 (12), 7390.
28. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.7390.
29. Stebliy, M.E., Bazrov, M.A., Namsaraev, Z.Z., Letushev, M.E., Kozlov, A.G., Antonov, V.A., Stebliy, E.V., Davydenko, A.V., Ognev, A.V., Shiota, Y., Ono, T., and Samardak, A.S. Nonuniform current-driven formation and displacement of the magnetic compensation point in variable-width nanoscale ferrimagnets. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, 15 (34), 40792-40798. DOI: 10.1021/acsami.3c08979.
30. Schubert, C., Hebler, B., Schletter, H., Liebig, A., Daniel, M., Abrudan, R., Radu, F., and Albrecht, M. Interfacial exchange coupling in Fe-Tb/[Co/Pt] heterostructures. *Physical Review B*, 2013, 87, 054415. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.054415.
31. Hassdenteufel, A., Hebler, B., Schubert, C., Liebig, A., Teich, M., Helm, M., Aeschlimann, M., Manfred, A., and Bratschitsch, R. Thermally assisted all-optical helicity dependent magnetic switching in amorphous Fe<sub>100-x</sub>Tb<sub>x</sub> alloy films. *Advanced Materials*, 2013, 25 (22), 3122–3128. DOI: 10.1002/adma.201300176.
32. Hebler, B., Hassdenteufel, A., Reinhardt, P., Karl, H., and Albrecht, M. Ferrimagnetic Tb–Fe alloy thin films: composition and thickness dependence of magnetic properties and all-optical switching. *Frontiers in Materials*, 2016, 3, 8. DOI: 10.3389/fmats.2016.00008.



Подана в журнал: 27.04.2024



УДК 538.955



DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.035-046



## ЭКВИВАЛЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ МИКРОМАГНИТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ ФЕРРИМАГНИТНЫХ СТРУКТУР



С. В. Баталов<sup>а</sup>, В. Д. Бессонов<sup>б</sup>, В. С. Теплов<sup>в</sup>, \* , А. В. Телегин<sup>г</sup>

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,  
ул. Софьи Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620108, Россия*

<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2036-2888>  [svbatalov@gmail.com](mailto:svbatalov@gmail.com);

<sup>б</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7837-4366>  [bessonov.v.d@gmail.com](mailto:bessonov.v.d@gmail.com);

<sup>в</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3986-4768>  [teplov.imp@mail.ru](mailto:teplov.imp@mail.ru);

<sup>г</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7209-4307>  [telegin@imp.uran.ru](mailto:telegin@imp.uran.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [teplov.imp@mail.ru](mailto:teplov.imp@mail.ru)

Адрес для переписки: ул. Софьи Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620108, Россия

Тел.: +7 (343) 378-37-43

Предложена и рассмотрена модель микромагнитного моделирования намагниченности ферримагнитной пленки, состоящей из сплава ферромагнитного и редкоземельного металлов. Показано, что модель качественно повторяет экспериментально наблюдаемые температурные зависимости намагниченности насыщения ферримагнитных сплавов для разного процентного содержания редкоземельного элемента, а также имеет аналогичную петлю магнитного гистерезиса. Результаты работы представляют интерес для теоретического анализа особенностей поведения намагниченности пленочных металлических наноструктур типа «ферримагнетик – тяжелый металл» и решения задач прикладного материаловедения и магнетизма.

**Ключевые слова:** ферримагнитные пленки, микромагнитное моделирование, намагниченность насыщения, магнитный гистерезис, магнитная анизотропия

### 1. Введение

В настоящее время активно исследуются эффекты спинтроники на тонкопленочных наноструктурах типа «ферромагнетик – тяжелый металл» с нарушенной симметрией инверсии, которые обладают сильным спин-орбитальным взаимодействием на интерфейсе толщиной в несколько атомных слоев [1, 2]. В таких наноструктурах наблюдается заметный вклад антисимметричного взаимодействия Дзялошинского – Мории, в результате чего в них могут возникать локализованные магнитные вихри (скирмионы) размером от нескольких нанометров до одного микрона [3–5]. На основе скирмионов был предложен новый тип памяти в виде элементов нейронной сети, трековой записи и т. п. [6–8]. Однако до сих пор не до конца ясны механизмы передвижения и стабилизации скирмионов в металлических магнитных наногетероструктурах. Для этого необходимо понимать фундаментальные причины, обуславливающие особенности магнитных и спинтранспортных свойств наноструктур, а также иметь способы эффективного управления их функциональными характеристиками, что является предметом большого количества теоретических и экспериментальных исследований [9–11]. Благодаря развитию компьютерных технологий фундаментальные исследования магнетизма низкоразмерных наноструктур, решение прикладных задач неразрушающего контроля, материаловедческий анализ, применяемые для прогнозирования ресурса материалов и металлоконструкций, успешно проводятся численными методами [12–14]. Например, микромагнитное моделирование сегодня фактически является стандартным методом



для определения равновесной конфигурации намагниченности и расчета ее динамики для различных нанообъектов. При этом наиболее распространенным является подход, основанный на интегрировании динамического уравнения Ландау – Лифшица – Гильберта (ЛЛГ) [15, 16]. Программные пакеты для микромагнитного моделирования, такие как MuMax<sup>3</sup> [17] и OOMMF [18], позволяют эффективно решать уравнение ЛЛГ для ферромагнетиков различной геометрии при заданных внешних полях и взаимодействиях между магнитными моментами [19–21]. Базовой концепцией микромагнитной теории является переход от дискретного рассмотрения магнитных моментов отдельного атома моделируемого образца к непрерывной функции распределения намагниченности. При этом предполагается, что длина вектора намагниченности остается постоянной, что невыполнимо в случае ферримагнитных структур с несколькими магнитными подрешетками. Вместе с тем исследования последних лет показали, что ферримагнетики обладают большим потенциалом для изучения и применения топологических магнитных структур, чем ферромагнетики, благодаря лучшим параметрам устойчивости основного состояния, минимального размера спиновых текстур, быстродействия, энергоэффективности и т. д. [22–25]. Отметим, что стандартная модель расчета в MuMax<sup>3</sup> ориентирована на однородные магнитные материалы. В ферримагнетике с двумя подрешетками, магнитные моменты которых противоположно направлены, каждая из подрешеток будет иметь свою намагниченность насыщения, обменную жесткость и т. д., что сложно смоделировать без кастомизированных расширений и требует специальной настройки. Поэтому решение задачи о равновесном распределении намагниченности в ферримагнетике численными методами является актуальным.

В работе предложено аппроксимировать ферримагнетик как двухслойную систему с эффективными значениями магнитных параметров слоев, которая отражает компромисс между различными физическими свойствами двух подсистем реального ферримагнетика. Показано, что предложенная полуэмпирическая модель численного расчета поведения намагниченности ферримагнитных структур методами микромагнитного моделирования хорошо согласуется с известными экспериментальными данными. Тем не менее данный подход является упрощенным и не может полностью отразить все нюансы поведения реального ферримагнетика, особенно если важны взаимодействия между подрешетками.

## 2. Описание модели ферримагнетика

Ферримагнетики (ФИМ) – магнитоупорядоченные среды, магнитную структуру которых можно представить двумя вложенными магнитными подрешетками. В простейшем случае это аморфный сплав двух материалов, например ферромагнитного (ФМ) – Co, Fe – и редкоземельного (РЗ) – Tb, Gd, Dy – ионов металла. В сплаве Co–Tb магнитная подрешетка Co образована спиновыми магнитными моментами 3d-электронов, а подрешетка Tb – орбитальными магнитными моментами 4f-электронов. Разная природа магнитных моментов делает подрешетки неравнозначными: обменным взаимодействием 4f-электронов Tb можно пренебречь, так как оно значительно меньше обменного взаимодействия между 3d-электронами Co, а их магнитное упорядочение является следствием косвенного обменного взаимодействия с подрешеткой Co. При этом реализуется антиферромагнитное упорядочение между магнитными подрешетками Co и Tb, и результирующая намагниченность  $M_s$  определяется как  $M_s = M_s \text{Co} - M_s \text{Tb}$ . Изменяя взаимную концентрацию атомов, можно переходить между условными состояниями (Co-насыщенное и Tb-насыщенное) что отражает преимущественный вклад в  $M_s$  одной из подрешеток. В первом случае вдоль внешнего поля будет ориентирована намагниченность в подрешетке Co, во втором случае – в подрешетке Tb. Обе подрешетки равнозначны с точки зрения вклада в результирующую намагниченность и отклика на действие внешнего магнитного поля. Отметим, что из-за разной природы магнитного момента магнито-транспортные и магнитооптические измерения будут регистрировать в основном только со-

стояние подрешетки Co. Такая особенность связана с тем, что 3d-электроны Co находятся ближе к уровню Ферми, чем 4f-электроны, обуславливающие магнитный момент Tb [26].

В данной работе предложена полуэмпирическая модель для расчета микромагнитной конфигурации ферримагнитных структур в пакете MuMax<sup>3</sup>, основанном на методе конечных разностей. В модели заданное пространство разбивается на идентичные прямоугольные объемы, каждому из которых сопоставляется магнитный момент фиксированной величины. Каждый магнитный момент участвует в ряде взаимодействий: магнитостатическом, обменном (прямом, косвенном, антисимметричном), с кристаллической решеткой, с внешним полем, со спин-поляризованным током и т. д. [17, 27]. Каждое взаимодействие можно характеризовать энергией, а с учетом фиксированного магнитного момента – некоторым эффективным полем [15], действующим на него. Далее программа ищет решения для уравнения ЛЛГ, которое описывает временную эволюцию системы под действием эффективного поля. В случае поиска стационарного решения программа определяет конфигурацию магнитных моментов, соответствующую минимальной суммарной энергии системы  $E_{\text{tot}}$  (1). Однако для описания ФИМ необходимо учесть дополнительные магнитные подрешетки. В случае ФИМ в среде задается два слоя одинаковой и фиксированной толщины, один из которых выполняет функцию ФМ, а второй – РЗ. Для слоя ФМ задаются намагниченность насыщения  $M_{s1}$ , энергия обменного взаимодействия  $E_{\text{ex}}^{1-1}$ , энергия перпендикулярной магнитной анизотропии  $E_u$  и прочие взаимодействия, характерные для рассматриваемой задачи (например, энергия взаимодействия Дзялошинского – Морие  $E_{\text{DM}}$ , если моделируется динамика скирмионов). Для слоя РЗ задается только намагниченность насыщения  $M_{s2}$  и отрицательная энергия межслоевого обменного взаимодействия  $E_{\text{ex}}^{1-2} < 0$ , все прочие энергии равны нулю.

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{ex}}^{1-1} + E_{\text{DM}} + E_u + E_{\text{ex}}^{1-2}. \quad (1)$$

В большинстве экспериментальных работ рассматриваются ФИМ-структуры на основе аморфных сплавов, полученных в результате одновременного распыления ФМ- и РЗ-материалов. Для изменения процентного отношения материалов изменяется скорость распыления одного из материалов и общее время напыления, так чтобы толщина структуры оставалась постоянной. Таким образом, величины  $M_{s1}$  и  $M_{s2}$  находятся в некоторой взаимосвязи. Для установления этой связи был использован полуэмпирический подход на основе экспериментальных данных. В работе [27] была изучена зависимость намагниченности насыщения пленок  $\text{Co}_{100-x}\text{Tb}_x$  с разным процентным отношением атомов при постоянной толщине пленки, равной 4 нм, от концентрации Tb (рис. 1 а). На основе этой зависимости можно сделать три важных для нашей модели вывода: зависимость линейная; концентрация, при которой суммарная намагниченность равна нулю, составляет ~20 % (при комнатной температуре); значение намагниченности насыщения  $M_0$  чистого Co, полученное в результате экстраполяции –  $M_0 \approx 10^6$  А/м, что меньше величины  $1,42 \cdot 10^6$  А/м, характерной для объемного кобальта. В работе [28] были проведены аналогичные измерения в пленках  $\text{Fe}_{100-x}\text{Tb}_x$  толщиной 20 нм. Интересно отметить, что в этом случае компенсация намагниченности также происходит при содержании Tb ~20 %, а экстраполированное значение намагниченности насыщения Fe меньше, чем в объемных образцах.

Таким образом, в нашей модели намагниченность насыщения  $M_s$  определяется линейной разностью вкладов подрешеток  $M_s = M_{s1} - M_{s2}$ . Намагниченность насыщения подрешеток  $M_{s1}$  и  $M_{s2}$  зависит от числа атомов каждого сорта  $N_1$  и  $N_2$  и их магнитного момента  $m_1$  и  $m_2$  как  $M_{si} = m_i N_i / V$ . Взаимосвязь между числом атомов задается процентом содержания атомов второго сорта  $p$ :

$$x = \frac{N_2}{N_1 + N_2}. \quad (2)$$

Тогда отношение суммарной намагниченности к намагниченности первой подрешетки можно выразить только через одну переменную – процент содержания атомов  $N_2$ :

$$\frac{M_s}{M_{s1}} = 1 - \frac{m_2}{m_1} \frac{x}{1-x}. \quad (3)$$

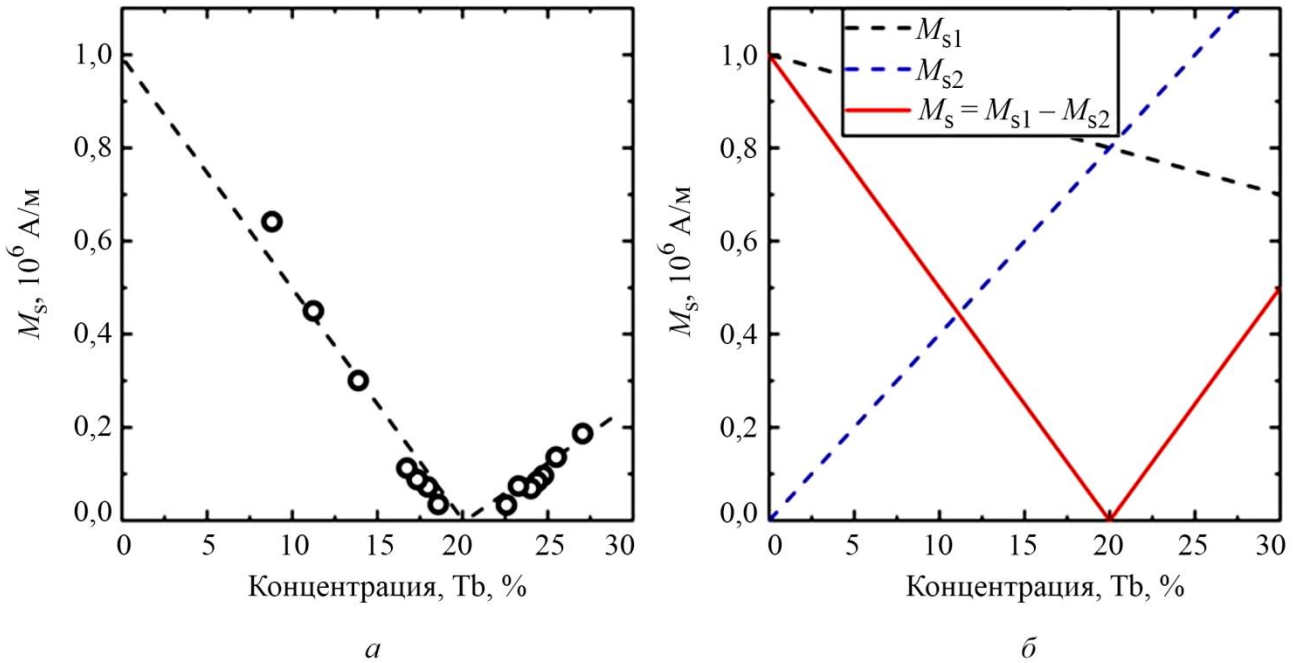


Рис. 1. Экспериментально полученная зависимость (круглые символы) намагниченности насыщения  $M_s$  для ФИМ-структуры W(4 нм)/Co<sub>100-x</sub>Tb<sub>x</sub>(4)/Ru(2) от процентного содержания атомов Tb по данным работы [27] (а); зависимость вкладов (пунктирные линии) каждой из подрешеток в результирующую намагниченность (сплошная линия), полученная на основе предложенной аналитической модели (б)

Из условия  $M_s = 0$  при  $p = 0,2$  (полученного экспериментально) следует, что  $m_2/m_1 = 4$ . Намагниченность сплава Co<sub>100-x</sub>Tb<sub>x</sub> можно выразить линейным соотношением  $M_s = M_0(1 - kx)$ . Тогда намагниченности подрешеток записываются следующим образом:

$$M_{s1} = \frac{M_0(1-kx)}{1 - \frac{m_2}{m_1} \cdot \frac{x}{1-x}}, \quad (4)$$

$$M_{s2} = \frac{M_0(1-kx)}{\frac{m_1}{m_2} \cdot \frac{1-x}{x} - 1}. \quad (5)$$

При  $x = 0,2$  происходит компенсация намагниченностей подрешеток (рис. 1 а), из чего получаем  $k = 5$ . На рис. 1 б приведены зависимости намагниченностей насыщения для каждой подрешетки и для их разности. Так как знак перед намагниченностью имеет относительный характер, то результирующее значение приведено в виде модуля.

Таким образом, простая стехиометрическая модель позволяет производить микромагнитное моделирование тонкопленочных ФИМ-систем с заданной концентрацией РЗ-атомов. Для этого исследуемая пленка заменяется двумя слоями с различными величинами  $M_{s1}$  и  $M_{s2}$ , полученными из соотношений (4) и (5) при заданной величине  $x$ .

### 3. Проверка применимости модели

Далее, для проверки предложенной модели было проведено компьютерное моделирование характерных для ФИМ зависимостей намагниченности от приложенного внешнего поля и от температуры. Экспериментальные исследования показывают, что с изменением температуры результирующий магнитный момент ФИМ сильно изменяется, вплоть до изменения типа насыщения. Такое поведение может быть обусловлено тем, что магнитные моменты РЗ-атомов имеют сперимагнитное упорядочение: образуют конус вдоль оси ориентации моментов ФМ [29]. С увеличением температуры в результате термодинамических флуктуаций раствор этого конуса увеличивается, и проекция на ось ФМ уменьшается, что равнозначно уменьшению вклада от второй подрешетки. С уменьшением температуры происходит обратный процесс. На рис. 2 а приведены температурные зависимости  $M_s$  для трех составов ФИМ, полученные на основе предложенной модели. Модель демонстрирует хорошее повторение зависимостей, наблюдаемых, например, в сплавах CoTb [27] и FeTb [28, 29]: изменение температуры приводит к переходу из состояния РЗ-насыщенное в ФМ-насыщенное при фиксированном составе; с ростом концентрации атомов РЗ температура компенсации увеличивается; в окрестностях точки компенсации намагниченность изменяется линейно от температуры. На рис. 2 б приведена визуализация магнитной структуры в слоях для разных значений температуры. При нулевой температуре слой 2 (РЗ) имеет больший магнитный момент, поэтому намагниченность в нем была бы выстроена вдоль внешнего магнитного поля, а в слое 1 – в противоположном направлении (1). При увеличении температуры термодинамические флуктуации нарушают магнитное упорядочение во втором слое гораздо сильнее из-за отсутствия прямого обменного взаимодействия (3). При некотором значении температуры это приведет к тому, что результирующая намагниченность в слое 2 вдоль оси  $z$  станет меньше, чем результирующая намагниченность в слое 1. Структура перейдет из состояния РЗ-насыщения в состояние ФМ-насыщения, после чего действие поля приведет к изменению ориентаций намагниченностей в слоях на противоположные (4).

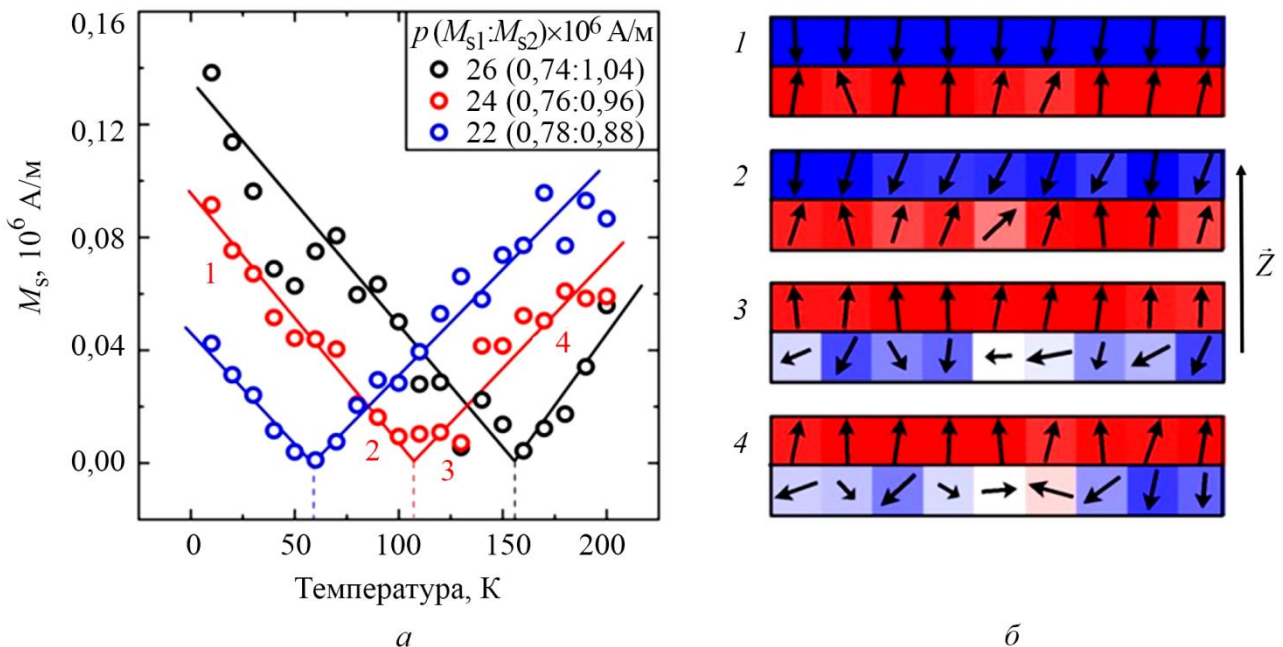


Рис. 2. Полученные в результате моделирования температурные зависимости намагниченности насыщения  $M_s$  (круглые символы) сплавов  $Co_{1-x}Tb_x$  (а); поперечные срезы магнитной структуры для разных областей температур (отмечены цифрами 1–4 на графике) при фиксированном составе и наличии намагничивающего поля в направлении  $+z$  (б)



Проведен характерный для магнетиков эксперимент – исследование петли магнитного гистерезиса. На рис. 3 *а* приведена экспериментальная петля гистерезиса для сплава FeTb в диапазоне полей до 7 Тл [30]. Как было показано авторами, в малых полях происходит переключение направления намагниченности в подрешетках на противоположное. В результате в центральной части зависимости наблюдается прямоугольная петля. При дальнейшем увеличении поля магнитная структура находится в квазистационарном состоянии (пунктирная линия на рис. 3 *а*): подрешетка с большим магнитным моментом выстроена по направлению поля, а с меньшим – противоположно полю из-за антиферромагнитного обменного взаимодействия.

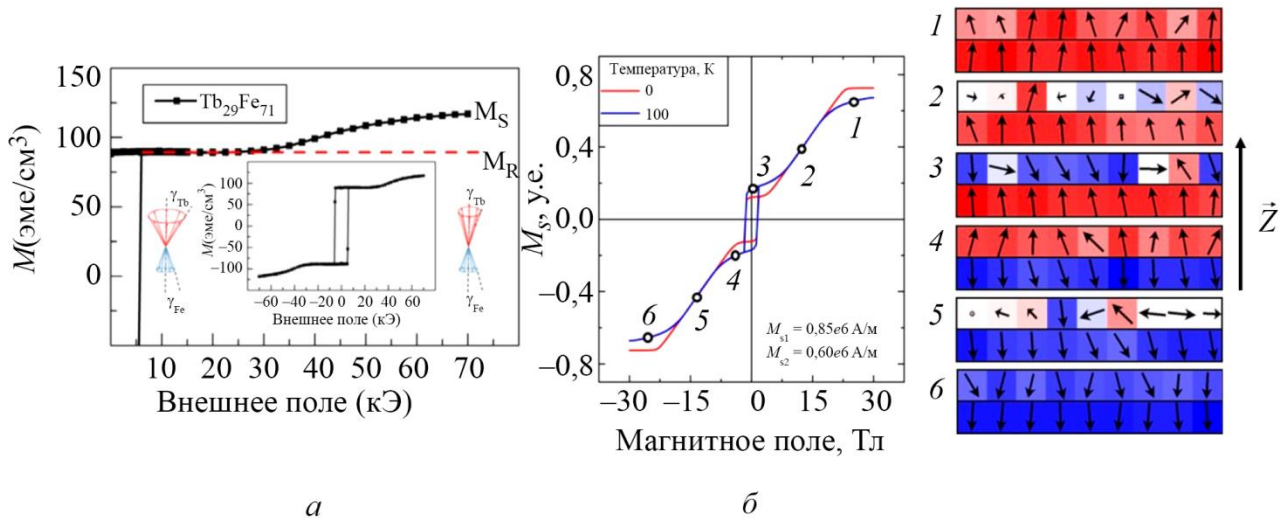


Рис. 3. Экспериментальная петля магнитного гистерезиса сплава Fe–Tb, полученная в диапазоне до 7 Тл (рисунок взят из работы [30]) (*а*); результаты микромагнитного моделирования петель гистерезиса намагниченности  $M$  по предложенной модели для разных значений температуры при содержании Tb  $x = 15\%$  (*б*). Справа приведены вертикальные срезы магнитной структуры при разных значениях внешнего поля.

Однако при некотором значении внешнее поле становится больше эффективного поля обменного взаимодействия, и в системе нарушается коллинеарное упорядочение: намагниченность в подрешетке с меньшим магнитным моментом начинает плавно поворачиваться вдоль поля. Это приводит к характерному плавному увеличению намагниченности в высоких полях. Предложенная модель ФИМ позволила качественно повторить зависимости, наблюдаемые в эксперименте. Результаты численного моделирования петли магнитного гистерезиса при концентрации Tb 15 % для температур 0 и 100 К приведены на рис. 3 *б*. Последовательное увеличение поля приводит сначала к переключению ориентации намагниченности в подрешетках (точка 3 для положительного поля и точка 4 для отрицательного), затем к нарушению коллинеарного упорядочения (точки 2 и 5) и дальнейшему выстраиванию вдоль поля (точки 1 и 6). Видно, что с увеличением температуры характеристические поля уменьшаются, а переход в состояние насыщения происходит более плавно, что качественно совпадает с экспериментальными результатами. Справа на рис. 3 *б* приведена визуализация спиновой структуры ФИМ на перечисленных этапах процесса при температуре 100 К. Неоднородное распределение намагниченности в конечных точках (точки 1 и 6) обусловлено термодинамическими флуктуациями.

#### 4. Заключение

В работе рассмотрена полуэмпирическая модель для микромагнитного моделирования намагниченности тонкопленочного ферримагнетика, которая дает качественное совпадение с результатами экспериментов для аморфных ферримагнитных сплавов, например CoTb и FeTb, широко используемых в различных материаловедческих технологиях. Предложенная эквивалентная модель позволяет удовлетворительно описать зависимость результирующего магнитного момента сплава от взаимной концентрации атомов переходного и редкоземельного металлов в слоях структуры, изменение результирующего магнитного момента сплава в зависимости от температуры при разных концентрациях редкоземельного металла, поведение петли магнитного гистерезиса, в том числе в больших полях. Разработанная модель может быть предложена для моделирования, например, поведения киральных спиновых текстур (скирмионов и т. п.) в многослойных металлических пленочных наноструктурах типа «ферримагнетик – тяжелый металл». На основании полученных результатов можно сделать вывод о перспективности внедрения новых технологий и методик исследования, таких как компьютерное моделирование, для более точного и эффективного анализа структуры и свойств магнитных материалов, прогнозирования и выявления оптимальных способов улучшения их характеристик.

#### Благодарность

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 21-72-20160 (<https://rscf.ru/en/project/21-72-20160>). Авторы также благодарят за помощь в работе ЦКП ДВФУ.*

#### Конфликт интересов

*Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.*

#### Литература

1. Stashkevich A. A. Spin-orbitronics a novel trend in spin oriented electronics // Journal of the Russian Universities. Radioelectronics. – 2019. – Vol. 22 (6). – P. 45–54. – DOI: 10.32603/1993-8985-2019-22-6-45-54.
2. Ustinov V. V., Yasyulevich I. A., Bebenin N. G. The chiral spin-orbitronics of a helimagnet–normal metal heterojunction // Physics of Metals and Metallography. – 2023. – Vol. 24. – P. 195–204. – DOI: 10.1134/S0031918X22601895.
3. Fert A., Van Dau F. N. Spintronics, from giant magnetoresistance to magnetic skyrmions and topological insulators // Comptes Rendus Physique. – 2019. – Vol. 20, Nos. 7–8. – P. 817–831. – DOI: 10.1016/j.crhy.2019.05.020.
4. Lorentz transmission electron microscopy for magnetic skyrmions imaging / J. Tang, L. Kong, W. Wang, Du H., M. Tian // Chinese Physics B. – 2019. – Vol. 28, No. 8. – P. 087503. – DOI: 10.1088/1674-1056/28/8/087503.
5. Fert A., Reyren N., Cros V. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications // Nature Reviews Materials. – 2017. – Vol. 2, No. 7. – P. 1–15. – DOI: 10.1038/natrevmats.2017.31.
6. Ding J., Yang X., Zhu T. Manipulating current induced motion of magnetic skyrmions in the magnetic nanotrack // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – Vol. 48, No. 11. – P. 115004. – DOI: 10.1088/0022-3727/48/11/115004.
7. A comparative cross-layer study on racetrack memories: domain wall vs skyrmion / W. Kang, B. Wu, X. Chen, D. Zhu, Z. Wang, X. Zhang, Y. Zhou, Y. Zhang, W. Zhao // ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems (JETC). – 2019. – Vol. 16, No. 1. – P. 1–17. – DOI: 10.1145/3333336.

8. Skyrmion-based artificial synapses for neuromorphic computing / K. M. Song, J. S. Jeong, B. Pan, X. Zhang, J. Xia, S. Cha, T.-E. Park, K. Kim, S. Finizio, J. Raabe, J. Chang, Y. Zhou, W. Zhao, W. Kang, H. Ju, S. Woo // *Nature Electronics*. – 2020. – Vol. 3, No. 3. – P. 148–155. – DOI: 10.1038/s41928-020-0385-0.
9. Göbel B., Mertig I., Tretiakov O. A. Beyond skyrmions: review and perspectives of alternative magnetic quasiparticles // *Physics Reports*. – 2021. – Vol. 895. – P. 1–28. – DOI: 10.1016/j.physrep.2020.10.001.
10. Dzyaloshinsky–Moriya interaction (DMI)-induced magnetic skyrmion materials / W.-S. Wei, Z.-D. He, Z. Qu, H.-F. Du // *Rare Metals*. – 2021. – Vol. 40, No. 11. – P. 3076–3090. – DOI: 10.1007/s12598-021-01746-9.
11. Ma M., Pan Z., Ma F. Artificial skyrmion in magnetic multilayers // *Journal of Applied Physics*. – 2022. – Vol. 132, No. 4. – P. 043906. – DOI: 10.1063/5.0095875.
12. Leliaert J., Mulkers J. Tomorrow's micromagnetic simulations // *Journal of Applied Physics*. – 2019. – Vol. 125, No. 18. – P. 180901. – DOI: 10.1063/1.5093730.
13. Micromagnetic manipulation and spin excitation of skyrmionic structures / L. Bo, C. Hu, R. Zhao, X. Zhang // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2022. – Vol. 55, No. 33. – P. 333001. – DOI: 10.1088/1361-6463/ac6cb2.
14. Magnetic direct-write skyrmion nanolithography / A. V. Ognev, A. G. Kolesnikov, Y. J. Kim, I. H. Cha, A. V. Sadovnikov, S. A. Nikitov, I. V. Soldatov, A. Talapatra, J. Mohanty, M. Mruczkiewicz, Y. Ge, N. Kerber, F. Dittrich, P. Virnau, M. Klaui, Y. K. Kim, A. S. Samardak // *ACS Nano*. – 2020. – Vol. 14, No. 11. – P. 14960–14970. – DOI: 10.1021/acsnano.0c04748.
15. Landau L., Lifshits E. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies // *Phys. Zeitsch. der Sow.* – 1935. – 8. – P. 153–169.
16. Gilbert T. L. A Lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetization field // *Physical Review D*. – 1955. – Vol. 100. – P. 1243.
17. The design and verification of MuMax3 / A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, M. Helten, F. Garcia-Sanchez, B. Van Waeyenberge // *AIP Advances*. – 2014. – Vol. 4, No. 10. – P. 107133. – DOI: 10.1063/1.4899186.
18. Donahue M. J., Porter D. G. OOMMF User's Guide, Version 1.0. – 1999. – DOI: 10.1002/HTTPS://DX.DOI.ORG/10.6028/NIST.IR.6376.
19. Теплов В. С., Бессонов В. Д., Телегин А. В. Численное моделирование поведения намагниченности в одноосных магнитных пленках // *Журнал радиоэлектроники*. – 2022. – No. 7. – DOI: 10.30898/1684-1719.2022.7.3. – URL: [http://jre.cplire.ru/jre/jul22/3/abstract\\_e.html](http://jre.cplire.ru/jre/jul22/3/abstract_e.html)
20. Gubanov V. A., Kruglyak V. V., Sadovnikov A. V. Controlling the modes of spin wave propagation in an yttrium iron garnet waveguide by local laser heating // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. – 2023. – Vol. 87, No. 3. – P. 362–366. – DOI: 10.3103/S1062873822701246.
21. 150-degree nonlinear magnetic oscillations in YIG films / V. S. Teplov, V. D. Bessonov, S. V. Batalov, A. V. Telegin // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. – 2022. – Vol. 35, No. 6. – P. 1389–1395. – DOI: 10.1007/s10948-022-06208-6.
22. Ivanov B. A. Ultrafast spin dynamics and spintronics for ferrimagnets close to the spin compensation point // *Low Temperature Physics*. – 2019. – Vol. 45, No. 9. – P. 935–963. – DOI: 10.1063/1.5121265.
23. Ferrimagnets for spintronic devices: from materials to applications / Y. Zhang, X. Feng, Z. Zheng, Z. Zhang, K. Lin, X. Sun, G. Wang, J. Wang, J. Wei, P. Vallobra, Y. He, Z. Wang, L. Chen, K. Zhang, Y. Xu, W. Zhao // *Applied J. Physics Reviews*. – 2023. – Vol. 10, No. 1. – P. 011301. – DOI: 10.1063/5.0104618.
24. Ferrimagnetic spintronics / S. K. Kim, G. S. Beach, K. J. Lee, T. Ono, T. Rasing, H. Yang // *Nature Materials*. – 2022. – Vol. 21 (1). – P. 24–34. – DOI: 10.1038/s41563-021-01139-4.

25. Barker J., Atxitia U. A review of modelling in ferrimagnetic spintronics // *Journal of the Physical Society of Japan*. – 2021. – Vol. 90 (8). – P. 081001. – DOI: 10.7566/JPSJ.90.081001.
26. Tanaka H., Takayama S., Fujiwara T. Electronic-structure calculations for amorphous and crystalline  $Gd_{33}Fe_{67}$  alloys // *Physical Review B*. – 1992. – Vol. 46 (12). – P. 7390. – DOI: 10.1103/PhysRevB.46.7390.
27. Nonuniform current-driven formation and displacement of the magnetic compensation point in variable-width nanoscale ferrimagnets / M. E. Stebliy, M. A. Bazrov, Z. Z. Namsaraev, M. E. Letushev, A. G. Kozlov, V. A. Antonov, E. V. Stebliy, A. V. Davydenko, A. V. Ognev, Y. Shiota, T. Ono, A. S. Samardak // *ACS Applied Materials & Interfaces*. – 2023. – Vol. 15 (34). – P. 40792–40798. – DOI: 10.1021/acsami.3c08979.
28. Interfacial exchange coupling in Fe–Tb/[Co/Pt] heterostructures / C. Schubert, B. Hebler, H. Schletter, A. Liebig, M. Daniel, R. Abrudan, F. Radu, M. Albrecht // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 87. – P. 054415. – DOI: 10.1103/PhysRevB.87.054415.
29. Thermally assisted all-optical helicity dependent magnetic switching in amorphous  $Fe_{100-x}Tb_x$  alloy films / A. Hassdenteufel, B. Hebler, C. Schubert, A. Liebig, M. Teich, M. Helm, M. Aeschlimann, A. Manfred, R. Bratschitsch // *Advanced Materials*. – 2013. – Vol. 25 (22). – P. 3122–3128. – DOI: 10.1002/adma.201300176.
30. Ferrimagnetic Tb–Fe alloy thin films: composition and thickness dependence of magnetic properties and all-optical switching / B. Hebler, A. Hassdenteufel, P. Reinhardt, H. Karl, M. Albrecht // *Frontiers in Materials*. – 2016. – Vol. 3. – P. 8. – DOI: 10.3389/fmats.2016.00008.



**Received:** 10.04.2024

**Revised:** 11.06.2024



**Accepted:** 16.08.2024

**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.4.047-056

## NUMERICAL ANALYSIS OF DEFORMATION UNDER COMPRESSION OF STRUCTURES BASED ON TRIPLY PERIODIC MINIMAL SURFACES

M. P. Varygina

*Krasnoyarsk Branch of the Federal Research Center for Information and Computational Technologies,  
53 Mira Ave., Krasnoyarsk, 660049, Russia*

 <https://orcid.org/0000-0002-5198-4893>  [vmp@ict.nsc.ru](mailto:vmp@ict.nsc.ru)

Email: [vmp@ict.nsc.ru](mailto:vmp@ict.nsc.ru)

Address for corresponding: пр-т Мира, 53, Красноярск, 660049, Россия

Tel.: +7 (391) 227-2912

Complex porous structures based on triply periodic minimal surfaces with high values of specific physical and mechanical characteristics are increasingly used in many industries. Numerical analysis is of great importance in evaluating the load-carrying capacity and mechanical behavior of such structures. The paper presents the results of finite element analysis of the stress-strained state of structures composed of triply periodic minimal surfaces and affected by compressive loading. The complexity of simulating the response of such structures to mechanical effects lies in the large dimension of the problem due to the need for fine discretization required for an adequate representation of the complex geometry of the model. The stages of constructing facet geometry for the construction of numerical models are shown. The effect of the type and parameters of these structures on their mechanical behavior under compression is exemplified by Schoen IWP surfaces and Schwarz primitives. Stiffness efficiency depending on the structure topology is analyzed.

**Keywords:** triply periodic minimal surfaces, finite element model, Schwarz primitive, Schoen IWP, stress-strain state

### References

1. Feng, J., Fu, J., Yao, X., and He, Y. Triply periodic minimal surface (TPMS) porous structures from multi-scale design, precise additive manufacturing to multidisciplinary applications. *International Journal of Extreme Manufacturing*, 2022, 4, 022001. DOI: 10.1088/2631-7990/ac5be6.
2. Gado, M.G., Al-Ketan, O., Aziz, M., Al-Rub, R.A., and Ookawara, S. Triply periodic minimal surface structures: design, fabrication, 3D printing techniques, state-of-the-art studies, and prospective thermal applications for efficient energy utilization. *Energy Technology*, 2024, 2301287. DOI: 10.1002/ente.202301287.
3. Schwarz, H.A. *Gesammelte Mathematische Abhandlungen*, Springer, Berlin, Heidelberg, 1890, 358 p.
4. Schoen, A.H. *Infinite Periodic Minimal Surfaces Without Self-Intersections*, DC NASA, Washington, 1970, 92 p.
5. Jones, A., Leary, M., Bateman, S., and Easton, M. Investigating mechanical properties of additively manufactured multimaterial gyroids: the effect of proportion, scale and shape. *Additive Manufacturing*, 2023, 76, 103784. DOI: 10.1016/j.addma.2023.103784.
6. Ramírez, E.A., Béraud, N., Pourroy, F., Villeneuve, F., and Museau, M. Design parameters effects on relative density of triply periodic minimal surfaces for additive manufacturing. *Procedia CIRP*, 2021, 100, 13–18. DOI: 10.1016/j.procir.2021.05.002.

7. Jones, A., Leary, M., Bateman, S., and Easton, M. Parametric design and evaluation of TPMS-like cellular solids. *Materials & Design*, 2022, 221, 110908. DOI: 10.1016/j.matdes.2022.110908.
8. Jones, A., Leary, M., Bateman, S., and Easton, M. A review of recent investigations on flow and heat transfer enhancement in cooling channels embedded with triply periodic minimal surfaces (TPMS). *Software Impacts*, 2021, 10, 100167. DOI: 10.3390/en15238994.
9. Eremin, A.V., Zinina, S.A., and Johnson, O.O. Investigation of heat transfer in a porous material. *Vestnik Yugorskogo Gosudarstvennogo Universiteta*, 2023, 1 (68), 60–66. (In Russian). DOI: 10.18822/byusu20230160-66.
10. Wang, E., Yao, R., Li, Q., Hu, X., and Sun, G. Lightweight metallic cellular materials: a systematic review on mechanical characteristics and engineering applications. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2024, 270, 108795. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2023.108795.
11. Dadashi, A. and Rahimi, G. A comprehensive investigation of the lattice structure mechanical properties based on Schwarz primitive triply periodic minimal surface: elastic modulus, yield strength, and maximum bearing force in the elastic region. *International Journal of Solids and Structures*, 2024, 295, 112776. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2024.112776.
12. Hsieh, M.-T. and Valdevit, L. Minisurf – a minimal surface generator for finite element modeling and additive manufacturing. *Software Impacts*, 2020, 6, 100026. DOI: 10.1016/j.simpa.2020.100026.
13. Jones, A., Leary, M., Bateman, S., and Easton, M. TPMS Designer: a tool for generating and analyzing triply periodic minimal surfaces. *Software Impacts*, 2021, 10, 100167. DOI: 10.1016/j.simpa.2021.100167.
14. Alketan, O. and Al-Rub, R.A. MSLattice: A free software for generating uniform and graded lattices based on triply periodic minimal surfaces. *Material Design & Processing Communications*, 2020, 3 (2). DOI: 10.1002/mdp2.205.
15. Raju, S.K.K. and Onkar, P.S. Lattice\_Karak: Lattice structure generator for tissue engineering, lightweighting and heat exchanger applications. *Software Impacts*, 2022, 14, 100425. DOI: 10.1016/j.simpa.2022.100425.

Подана в журнал: 10.04.2024



УДК 539.32

DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.047-056

## ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПРИ СЖАТИИ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ТРИЖДЫ ПЕРИОДИЧЕСКИХ МИНИМАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

М. П. Варыгина

*Красноярский филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
«Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий»,  
пр-т Мира, 53, Красноярск, 660049, Россия*

 <https://orcid.org/0000-0002-5198-4893>  [vmp@ict.nsc.ru](mailto:vmp@ict.nsc.ru)

Электронная почта: [vmp@ict.nsc.ru](mailto:vmp@ict.nsc.ru)

Адрес для переписки: пр-т Мира, 53, Красноярск, 660049, Россия

Тел.: +7 (391) 227-29-12

Сложные пористые структуры, основанные на трижды периодических минимальных поверхностях, обладающие высокими удельными показателями физико-механических характеристик, находят все более широкое применение во многих отраслях промышленности. Численный анализ имеет большое значение при оценке несущей способности и механического поведения таких структур. В работе представлены результаты конечно-элементного анализа напряженно-деформированного состояния структур, составленных из трижды периодических минимальных поверхностей, под действием сжимающей нагрузки. Сложность моделирования отклика таких структур на механическое воздействие заключается в большой размерности задачи, обусловленной необходимостью мелкой дискретизации, требуемой для адекватного представления сложной геометрии модели. Показаны этапы построения фасетной геометрии для формирования численных моделей. На примере поверхностей Шёна IWP и примитивов Шварца рассмотрено влияние типа и параметров данных структур на их механическое поведение при сжатии. Выполнен анализ жесткостной эффективности в зависимости от топологии структур.

**Ключевые слова:** трижды периодические минимальные поверхности, конечно-элементная модель, примитивы Шварца, поверхности Шёна, напряженно-деформированное состояние

### 1. Введение

Достижения в развитии технологий аддитивного производства позволяют проектировать и изготавливать сложные пористые структуры с контролируемой геометрией и заданными механическими свойствами на макро-, мезо- и микроуровнях [1, 2]. Среди них выделяют материалы и конструкции на основе трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП) характеризующихся регулярно повторяющимися элементарными ячейками, представляющими собой поверхности с нулевой средней кривизной [3, 4]. Трижды периодические минимальные поверхности являются бесконечными, периодическими и не имеют пересечений в трехмерном евклидовом пространстве. Первым примером ТПМП была минимальная поверхность Шварца, открытая в 1865 году [3]. Почти сто лет спустя А. Шён в работе [4] представил множество типов минимальных поверхностей.

По сравнению с другими видами пористых структур, ТПМП обладают рядом преимуществ, так как их геометрия может быть точно выражена математическими функциями. Регулируя параметры функции, можно контролировать основные характеристики, такие как пористость или удельная площадь поверхности [5–8]. Кроме того, ТПМП ладкие, без острых

краев и стыков, в отличие от решетчатых структур, что позволяет избежать концентрации напряжений, вызванной резкими изменениями в геометрии.

Благодаря таким свойствам, как пористость, высокие удельные показатели физико-механических характеристик, исключительная способность поглощать энергию и легкость адаптации для разнообразных приложений, различные топологии таких структур находят все более широкое применение во многих отраслях промышленности для механического демпфирования, контроля вибрации, звукоизоляции, улучшения тепловых характеристик каналов охлаждения [9–11].

В последнее время активно разрабатываются различные инструменты проектирования, упрощающие построение геометрически сложных конструкций [12–15]. Самый простой инструмент MiniSurf [12] позволяет визуализировать основные типы элементарных ячеек и экспортировать только поверхность. TPMS Designer [13] – графический пользовательский интерфейс, позволяющий создавать структуры с контролируемым размером, масштабом, вращением ячеек. Расширенным функционалом обладают инструменты MSLattice [14] и Lattice\_Karak [15], позволяющие проводить гибридизацию ячеек (объединение нескольких различных типов структур ТППП), создавать иерархические структуры, изменять пористость и плотность структуры. Обычно создание первоначальной фасетной геометрии в программах для проектирования ТППП выполняется с помощью алгоритма триангуляции Делоне, который может приводить к образованию множества мельчайших фасет с острыми углами. Поэтому для получения качественной конечно-элементной сетки требуется проводить регуляризацию фасетной геометрии.

Проектирование структур ТППП, соответствующих требованиям конкретных приложений, требует интеграции геометрического моделирования, численного анализа и оптимизации топологии. Численный анализ играет решающую роль в этой системе, особенно при оценке несущей способности и механического поведения конструкций.


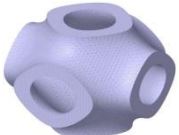
Цель данной работы заключается в конечно-элементном анализе влияния топологии и геометрических параметров на механическое поведение структур ТППП под действием сжимающей нагрузки и определении их жесткостной эффективности.

## 2. Постановка задачи и методы решения

В настоящее время существует около 45 видов минимальных поверхностей, среди них выделяют поверхности Шёна IWP (Schoen I-graph-Wrapped-Packages) и примитивы Шварца (Schwarz Primitives). Уравнения этих трижды периодических минимальных поверхностей состоят из тригонометрических функций и определяются согласно табл. 1.

Таблица 1

Математические уравнения трижды периодических минимальных поверхностей

Вид	Уравнение	Структура
Поверхность Шёна IWP	$2 \left( \cos \frac{2\pi x}{\alpha} \cos \frac{2\pi y}{\beta} + \cos \frac{2\pi y}{\beta} \cos \frac{2\pi z}{\gamma} + \cos \frac{2\pi x}{\alpha} \cos \frac{2\pi z}{\gamma} - \left( \cos \frac{4\pi x}{\alpha} + \cos \frac{4\pi y}{\beta} + \cos \frac{4\pi z}{\gamma} \right) \right) = c$	
Примитив Шварца	$\cos \frac{2\pi x}{\alpha} + \cos \frac{2\pi y}{\beta} + \cos \frac{2\pi z}{\gamma} = c$	



Здесь  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  – константы, связанные с размером единичной ячейки в направлении декартовых координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  соответственно,  $c$  – параметр, характеризующий отношение толщины к относительной плотности структуры. Меньшему значению параметра  $c$  соответствует меньшая толщина стенки элементарной ячейки.

На рис. 1 представлены этапы построения фасетной геометрии на примере поверхности Шёна IWP. На первом этапе минимальные поверхности с выбранными геометрическими параметрами в виде STL-файлов импортируются в программное обеспечение SpaceClaim. В силу симметрии структуры достаточно построить 1/8 часть элементарной ячейки. Из-за особенностей построения геометрии возникают участки «плохих» фасет с экстремально острыми углами, как показано стрелками на увеличенном изображении (рис. 1 а). Такие области необходимо изменить перед созданием конечно-элементной сетки для исключения возникновения концентрации напряжений. На рис. 1 б показана фасетная геометрия после этапа регуляризации. Отклонение поверхности на сетке с размером ячейки 0,5 мм после регуляризации составляет 0,03–0,06 мм. Затем с помощью отражения в трех направлениях достраивается элементарная ячейка (рис. 1 в). На последнем этапе строится структура, образуемая копированием нескольких элементарных ячеек в трех направлениях (рис. 1 г).

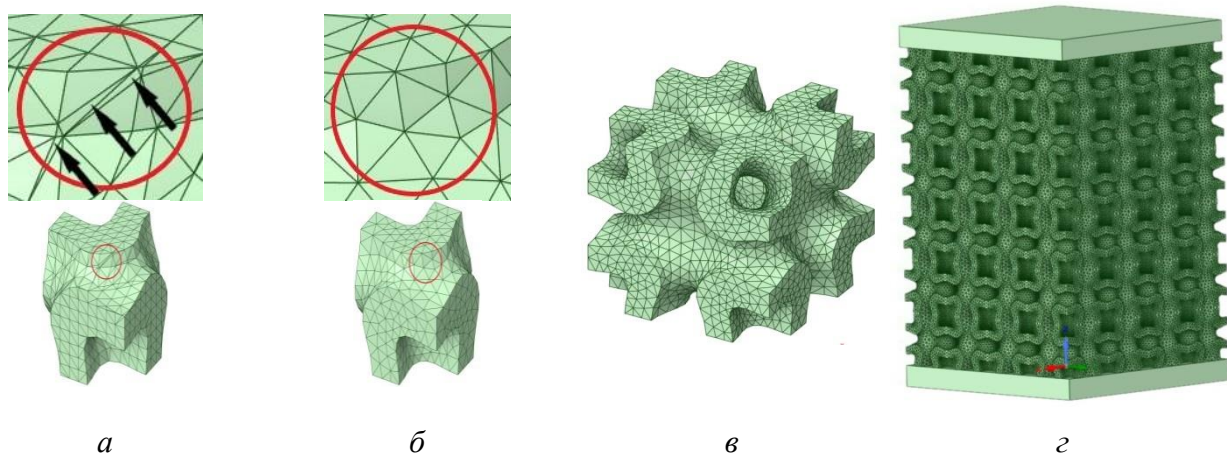


Рис. 1. Этапы построения фасетной геометрии: импорт STL-файла 1/8 части элементарной ячейки (а); регуляризация геометрии (б); построение элементарной ячейки (в); построение структуры, составленной из элементарных ячеек (г)

Для численного анализа средствами пакета прикладных программ Ansys построены конечно-элементные модели структур поверхностей Шёна IWP и примитивов Шварца, геометрические параметры которых приведены в табл. 2. Отметим, что напряженно-деформированное состояние рассмотренных структур можно охарактеризовать на основе расчетов только элементарной ячейки. Однако в данной работе использовались образцы, состоящие из нескольких ячеек, чтобы иметь возможность валидации численного анализа с результатами планируемых экспериментальных исследований.

На рис. 2 представлены конечно-элементные модели структур, составленных из элементарных ячеек поверхностей Шёна IWP и примитивов Шварца, зажатых между двумя пластинами. Размер элементарной ячейки составляет  $20 \times 20 \times 20 \text{ мм}^3$ , параметр  $\alpha = 20$  при минимальном параметре  $c$ . Толщина пластин – 4 мм. Нижняя пластина зафиксирована. На верхнюю пластину действует распределенная сила в 96215 Н для поверхности Шёна IWP и 28000 Н для примитивов Шварца, разбитая на 5 этапов нагружения.

Для описания механического поведения структур выбрана модель упругого материала с параметрами, близкими к параметрам фотополимерной смолы, определенным

экспериментально: модуль Юнга  $E = 1943$  МПа, коэффициент Пуассона  $\nu = 0,43$ , плотность  $\rho = 1,184$  г/см<sup>3</sup>.

Таблица 2

Геометрические параметры структур

Тип структуры			IWP		Примитив	
Параметр $\alpha = \beta = \gamma$	Размер элементарной ячейки, мм <sup>3</sup>	Число элементарных ячеек	Параметр $c$	Объем структуры, мм <sup>3</sup>	Параметр $c$	Объем структуры, мм <sup>3</sup>
10	$10 \times 10 \times 10$	$4 \times 4 \times 6$	1,6	41486	0,5	27459
			1,8	47430	0,6	33417
			2,0	53409	0,7	39099
20	$20 \times 20 \times 20$	$2 \times 2 \times 3$	1,6	41258	0,5	27463
			1,8	46720	0,6	33068
			2,0	52310	0,7	38659

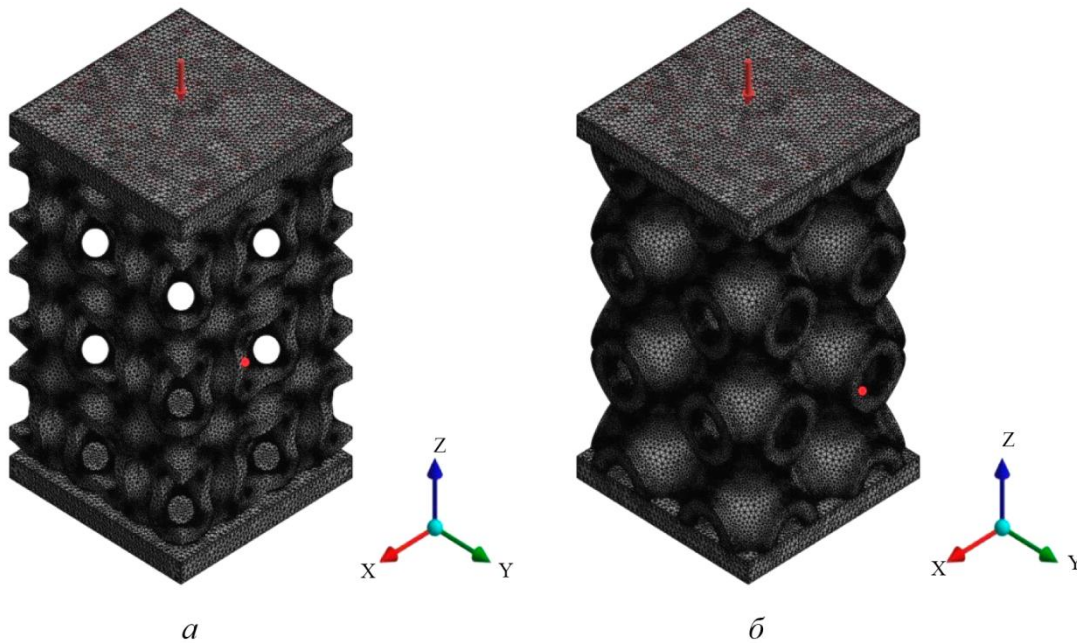


Рис. 2. Конечно-элементная модель структур ТПМП: поверхность Шёна IWP (а); примитив Шварца (б)

### 3. Результаты и обсуждение

Ниже приведены результаты расчетов для структур ТПМП, основанных на поверхности Шёна IWP при  $\alpha = 20$ ,  $c = 1,6$  и примитиве Шварца при  $\alpha = 20$ ,  $c = 0,5$ , которые отражают общий характер деформирования для соответствующего типа структуры. На рис. 3 представлены поля деформаций рассмотренных структур, направленные по оси приложения нагрузки (нижний ряд) и перпендикулярно этой оси (верхний ряд). Представлены центральные части при перемещении верхней пластины на 3 мм.

Для обоих типов структур ТПМП максимальные растягивающие деформации возникают на краях отверстий. При этом их наибольшие значения наблюдаются для структуры на основе примитива Шварца. Максимальные деформации сжатия действуют на горизонтальных стенках элементарной ячейки структуры поверхности Шёна за счет возникновения изгиба.

Также повышенный уровень сжимающих деформаций для всех типов структур достигается на границах между элементарными ячейками в местах с наименьшей площадью сечения.

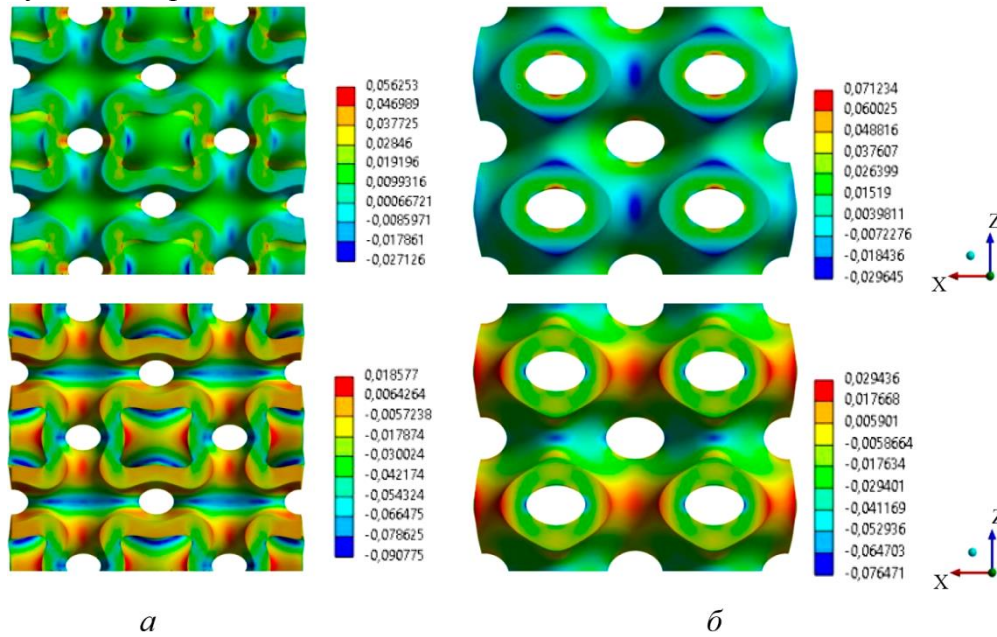


Рис. 3. Распределение деформаций структур в направлении осей  $X$  и  $Z$ : поверхность Шёна IWP (а); примитив Шварца (б)

На рис. 4 изображено распределение эквивалентных напряжений Мизеса для рассмотренных структур. Для структуры Шёна их максимальные значения достигаются в местах примыкания горизонтальных стенок к внутренней области элементарной ячейки. Для примитивов Шварца максимальные напряжения действуют на границах отверстий. Более высокие значения напряжений, характерные для структуры Шёна, свидетельствуют о ее большей жесткости по сравнению со структурой Шварца.

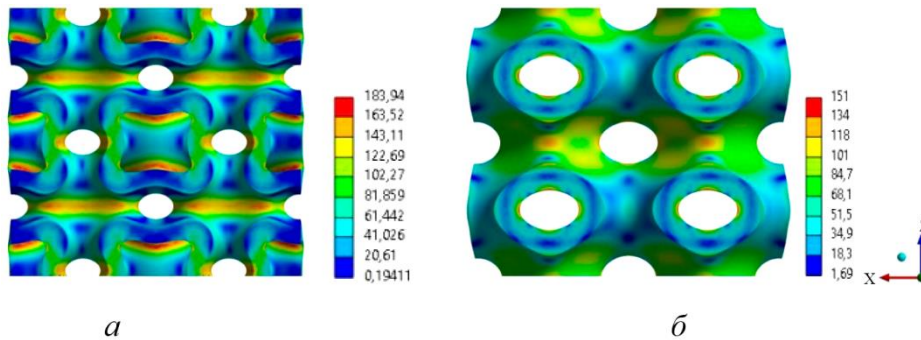


Рис. 4. Поля эквивалентных напряжений Мизеса: поверхность Шёна IWP (а); примитив Шварца (б)

На рис. 5 представлены зависимости вертикального перемещения контрольной точки от приложенной нагрузки для различных вариаций параметров структур Шёна IWP и примитивов Шварца (табл. 2) под действием сжимающей нагрузки вдоль оси  $Z$ . Контрольные точки расположены в центре внутренней границы вертикальной стенки элементарной ячейки (рис. 2). Согласно полученным результатам, среди структур Шёна IWP образец с параметрами  $\alpha = 10$  и  $c = 2,0$  является наиболее жестким, а образец с параметрами  $\alpha = 20$  и  $c = 1,6$  – наиболее податливым. Это говорит о том, что наибольший вклад в жесткостные характеристики для образцов с одним и тем же размером элементарной ячейки вносит параметр  $c$ , ха-



рактически характеризующий толщину стенки. Среди структур, составленных из примитивов Шварца, образец с наибольшими значениями геометрических параметров ячейки ( $\alpha = 20, c = 0,7$ ) обладает наибольшей жесткостью, а образец с наименьшими значениями этих параметров ( $\alpha = 10, c = 0,5$ ) – наибольшей податливостью. В отличие от структур Шёна, увеличение размера элементарной ячейки ведет к увеличению жесткости образца.

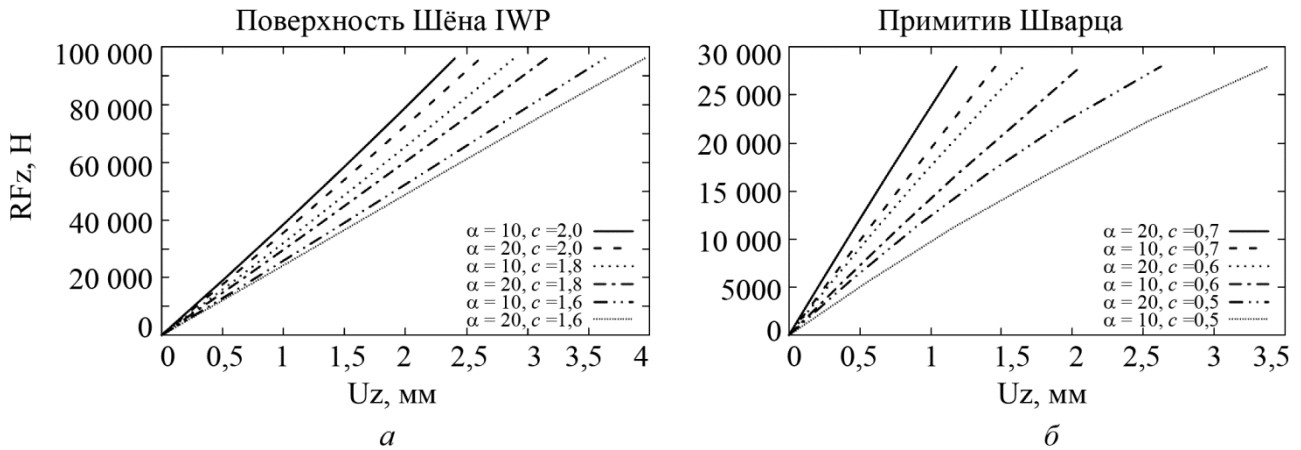


Рис. 5. Диаграммы «сила – перемещение» при различных параметрах: поверхность Шёна IWP (а); примитив Шварца (б)

Для оценки эффективности различных структур с вариацией параметров можно ввести коэффициент, характеризующий удельную жесткость структуры, который определяется как отношение силы к произведению перемещения на массу структуры (рис. 6). Согласно полученным результатам, максимальное значение коэффициента жесткостной эффективности достигается для структуры Шёна IWP при  $\alpha = 10$  и  $c = 2,0$ . Отметим, что значение этого показателя для наиболее жесткого примитива Шварца практически совпадает с наиболее податливой структурой на основе поверхности Шёна.

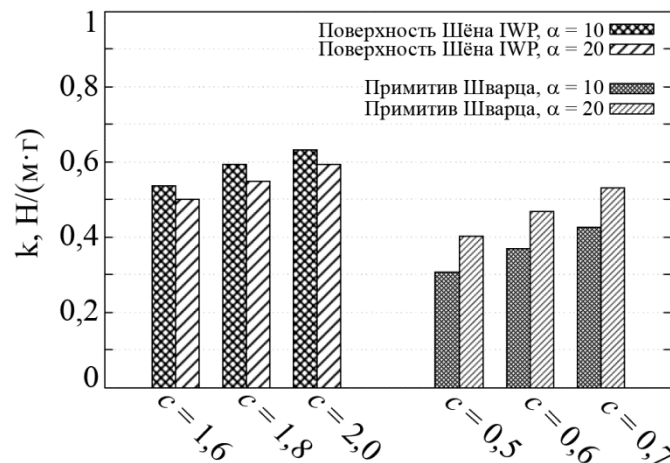


Рис. 6. Коэффициент жесткостной эффективности для поверхностей Шёна IWP и примитивов Шварца

#### 4. Заключение

Результаты численного моделирования минимальных трижды периодических поверхностей свидетельствуют о выраженной зависимости их жесткости при сжатии от типа, геометрических параметров и размера элементарной ячейки. С уменьшением размера элемен-

тарной ячейки структура на основе поверхностей Шёна IWP становится более жесткой, тогда как для примитивов Шварца жесткость находится в прямой зависимости от размера элементарной ячейки. При этом структуры IWP являются более жесткими на единицу массы по сравнению с примитивами Шварца. Результаты численного моделирования могут быть использованы для принятия решения о выборе конфигурации структуры ТППИ, соответствующей заданным механическим характеристикам.

## Литература

1. Triply periodic minimal surface (TPMS) porous structures from multi-scale design, precise additive manufacturing to multidisciplinary applications / J. Feng, J. Fu, X. Yao, Y. He // *International Journal of Extreme Manufacturing*. – 2022. – Vol. 4. – P. 022001. – DOI: 10.1088/2631-7990/ac5be6.
2. Triply periodic minimal surface structures: design, fabrication, 3D printing techniques, state-of-the-art studies, and prospective thermal applications for efficient energy utilization / M. G. Gado, O. Al-Ketan, M. Aziz, R. A. Al-Rub, S. Ookawara // *Energy Technology*. – 2024. – 2301287. – DOI: 10.1002/ente.202301287.
3. Schwarz H. A. *Gesammelte Mathematische Abhandlungen*. – Berlin, Heidelberg : Springer, 1890. – 358 p.
4. Schoen A. H. *Infinite Periodic Minimal Surfaces without Self-Intersections*. – Washington : DC NASA, 1970. – 92 p.
5. Investigating mechanical properties of additively manufactured multimaterial gyroids: the effect of proportion, scale and shape / A. Jones, M. Leary, S. Bateman, M. Easton // *Additive Manufacturing*. – 2023. – Vol. 76. – P. 103784. – DOI: 10.1016/j.addma.2023.103784.
6. Design parameters effects on relative density of triply periodic minimal surfaces for additive manufacturing / E. A. Ramírez, N. Béraud, F. Pourroy, F. Villeneuve, M. Museau // *Procedia CIRP*. – 2021. – Vol. 100. – P. 13–18. – DOI: 10.1016/j.procir.2021.05.002.
7. Parametric design and evaluation of TPMS-like cellular solids / A. Jones, M. Leary, S. Bateman, M. Easton // *Materials & Design*. – 2022. – Vol. 221. – P. 110908. – DOI: 10.1016/j.matdes.2022.110908.
8. A review of recent investigations on flow and heat transfer enhancement in cooling channels embedded with triply periodic minimal surfaces (TPMS) / A. Jones, M. Leary, S. Bateman, M. Easton // *Software Impacts*. – 2021. – Vol. 10. – P. 100167. – DOI: 10.3390/en15238994.
9. Еремин А. В., Зинина С. А., Джонсон О. О. Исследование теплопереноса в пористом материале на основе трижды периодических поверхностей минимальной энергии // *Вестник Югорского государственного университета*. – 2023. – Т. 1 (68). – С. 60–66. – DOI: 10.18822/byusu20230160-66.
10. Lightweight metallic cellular materials: a systematic review on mechanical characteristics and engineering applications / E. Wang, R. Yao, Q. Li, X. Hu, G. Sun // *International Journal of Mechanical Sciences*. – 2024. – Vol. 270. – P. 108795. – DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2023.108795.
11. Dadashi A., Rahimi G. A comprehensive investigation of the lattice structure mechanical properties based on Schwarz primitive triply periodic minimal surface: elastic modulus, yield strength, and maximum bearing force in the elastic region // *International Journal of Solids and Structures*. – 2024. – Vol. 295. – P. 112776. – DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2024.112776.
12. Hsieh M.-T., Valdevit L. Minisurf – a minimal surface generator for finite element modeling and additive manufacturing // *Software Impacts*. – 2020. – Vol. 6. – P. 100026. – DOI: 10.1016/j.simpa.2020.100026.
13. TPMS Designer: a tool for generating and analyzing triply periodic minimal surfaces / A. Jones, M. Leary, S. Bateman, M. Easton // *Software Impacts*. – 2021. – Vol. 10. – P. 100167. – DOI: 10.1016/j.simpa.2021.100167.



14. Alketan O., Al-Rub R. A. MSLattice: a free software for generating uniform and graded lattices based on triply periodic minimal surfaces // Material Design & Processing Communications. – 2020. – Vol. 3 (2). – DOI: 10.1002/mdp2.205.
15. Raju S. K. K., Onkar P. S. Lattice\_Karak: lattice structure generator for tissue engineering, lightweighting and heat exchanger applications // Software Impacts. – 2022. – Vol. 14. – P. 100425. – DOI: 10.1016/j.simpa.2022.100425.

**Received:** 06.06.2024

**Revised:** 06.08.2024



**Accepted:** 16.08.2024



**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.4.057-069



## MECHANICAL PROPERTIES OF AN Fe–Ti–Ni–B–C SHS COMPOSITE



N. B. Pugacheva<sup>a</sup>, A. V. Nokhrina<sup>b, \*</sup>, E. I. Senaeva<sup>c</sup>, and R. A. Savrai<sup>d</sup>

*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russia*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8015-8120>  nat@imach.uran.ru;

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0009-0004-8283-9690>  nokhrina2000@mail.ru;

<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8625-2310>  katty14-12@yandex.ru;

<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9873-3621>  ras@imach.uran.ru

\*Corresponding author. E-mail: nokhrina2000@mail.ru

Address for correspondence: ul. Komsomolskaya, 34, Ekaterinburg, 620049, Russia  
Tel.: +7 (902) 259-3642

The paper studies the structure, mechanical properties and wear resistance of a composite produced by self-propagating high-temperature synthesis (SHS) with an average chemical composition, wt%:  $35.47 \pm 1.5$  Fe;  $24.08 \pm 1.4$  Ti;  $13.99 \pm 0.5$  Ni;  $17.91 \pm 0.4$  B;  $8.54 \pm 0.5$  C. Testing has revealed that the composite has wear resistance on a level with one of the Hardox 500 wear-resistant steels. The composite is characterized by a wide range of values of transverse bending strength  $R_{bm30}$  from 200 to 800 MPa. Steel 40X shows a bending strength  $R_{bm30}$  of 1590 MPa, and the values of this characteristic for the Hardox 500 steel range between 2970 and 3020 MPa. The composite has low impact strength values  $KCU = 0.02$  MJ/m<sup>2</sup>, compared with  $KCU = 0.35$  MJ/m<sup>2</sup> for steel 40X and  $KCU = 1.59$  MJ/m<sup>2</sup> for Hardox 500. The Fe–Ni–Ti–C–B SHS composite should not be used for bending parts and those experiencing shock loads; however, it suits perfectly for protecting the surfaces of parts subject to intense abrasive wear.

**Keywords:** self-propagating high-temperature synthesis (SHS), SHS composite, microstructure, abrasive wear resistance, bending strength, impact strength

### Acknowledgment

*The work was performed under the state assignment for the IES UB RAS, theme No. 124020700063-3.*

### References

1. Amosov, A.P., Borovinskaya, I.P., and Merzhanov, A.G. *Poroshkovaya tekhnologiya samorasprostranyayushchegosya vysokotemperaturnogo sinteza materialov* [Powder Technology of Self-Propagating High-Temperature Synthesis of Materials]. Mashinostroenie–1 Publ., Moscow, 2007, 472 p. (In Russian).
2. Merzhanov, A.G. *Tverdoplamennoe gorenie* [Solid-Flame Combustion]. ISMAN Publ., Chernogolovka, 2000, 238 p. (In Russian).
3. *Samorasprostranyayushchiysya vysokotemperaturnyi sintez: teoriya i praktika* [Self-Propagating High-Temperature Synthesis, Theory and Practice: Collection of Articles, ed. by A.E. Sychev]. Territoriya Publ., Chernogolovka, 2001, 432 p. (In Russian).
4. Pugacheva, N.B., Nikolin, Yu.V., Senaeva, E.I., and Malygina, I.Yu. Structure of Fe–Ni–Ti–C–B SHS composites. *Physics of Metals and Metallography*, 2019, 120 (11), 1078–1084. DOI: 10.1134/S0031918X19110139.

5. Pugacheva, N.B., Nikolin, Yu.V., Bykova, T.M., and Senaeva, E.I. Structure and properties of a SHS Cu–Ti–C–B composite. *Physics of Metals and Metallurgy*, 2022, 123 (1), 43–49. DOI: 10.1134/S0031918X22010100.
6. Mofa, N.N., Sadykov, B.S., Bakkara, A.E., Zhuranova, G.S., and Mansurov, Z.A. Production of metal-ceramic SHS composites based on mechanochemically treated systems. *Gorenie i Plazmokhimiya*, 2018, 16 (3–4), 159–171. (In Russian).
7. Sychev, A.E., Kamynina, O.K., Umarov, L.M., Shchukin, A.S., and Zhidkov, M.V. SHS of composite materials based on Ti-Co. *Fundamentalnye Issledovaniya*, 2014, 12, 1912–1916. (In Russian).
8. Xinghong, Z., Qiang, X., Jiecai, H., and Kvanin, V.L. Self-propagating high temperature combustion synthesis of TiB/Ti composites. *Materials Science and Engineering: A*, 2003, 348 (1–2), 41–46. DOI: 10.1016/S0921-5093(02)00635-4.
9. Fan, Q., Chai, H., and Jin, Z. Role of iron addition in the combustion synthesis of TiC–Fe cermet. *Journal of Materials Science*, 1997, 32, 4319–4323. DOI: 10.1023/A:1018667722150.
10. LaSalvia, J.C., Meyers, M.A. Combustion synthesis in the Ti–C–Ni–Mo system. Part II. Analysis. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1995, 26, 3011–3019. DOI: 10.1007/BF02669657.
11. Zhang, X., He, X., Han, J., Qu, W., Kvalin, V.L. Combustion synthesis and densification of large-scale TiC–xNi cermets. *Materials Letters*, 2002, 56 (3), 183–187. DOI: DOI: 10.1016/S0167-577X(02)00437-8.
12. Zhang, W., Zhang, X., Wang, J., and Hong, C. Effect of Fe on the phases and microstructure of TiC–Fe cermets by combustion synthesis/quasi-isostatic pressing. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 381 (1–2), 92–97. DOI: 10.1016/j.msea.2004.04.026.
13. Shcherbakov, V.A., Gryadunov, A.N., Barinov, Yu.N., and Botvina, O.I. Synthesis and properties of composites based on zirconium and chromium borides. *Izvestiya Vuzov. Poroshkovaya Metallurgiya i Funktsionalnye Pokrytiya*, 2018, 1, 18–25. (In Russian). DOI: 10.17073/1997-308X-2018-1-18-25.
14. Manucharyan, A.G., Kikanyan, S.L., and Khachatryan, E.A. Corrosion resistance of a Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>–30%TiN metal-ceramic SHS composite to the sulfuric-acid–phosphoric-acid–water triple mixture *Molodoy Uchenyi*, 2014, 2 (61), 260–263.
15. Nikolin, Yu.V., Matevosyan, M.B., Kochugov, S.P., and Pugacheva, N.B. RF Patent No. 2680489, Byull. Izobret. No. 6, 2019.

Подана в журнал: 06.06.2024



УДК 669.017.165



DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.057-069



## ИЗНОСОСТОЙКОСТЬ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТА СИСТЕМЫ Fe–Ti–Ni–B–C



Н. Б. Пугачева<sup>a</sup>, А. В. Нохрина<sup>b</sup>, \* Е. И. Сенаева<sup>b</sup>, Р. А. Саврай<sup>г</sup>

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт машиноведения имени Э. С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук,  
ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург, 620049, Россия*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8015-8120>  [nat@imach.uran.ru](mailto:nat@imach.uran.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0009-0004-8283-9690>  [nokhrina2000@mail.ru](mailto:nokhrina2000@mail.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8625-2310>  [katty14-12@yandex.ru](mailto:katty14-12@yandex.ru);

<sup>г</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9873-3621>  [ras@imach.uran.ru](mailto:ras@imach.uran.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [nokhrina2000@mail.ru](mailto:nokhrina2000@mail.ru)  
Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, 620049, Россия  
Тел.: +7 (902) 259-36-42

Исследована структура, механические свойства и износостойкость композита, полученного методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), со средним химическим составом, вес. %: 35,47 ± 1,5 Fe; 24,08 ± 1,4 Ti; 13,99 ± 0,5 Ni; 17,91 ± 0,4 В; 8,54 ± 0,5 С. В результате испытаний установлено, что композит обладает износостойкостью на уровне с одной из износостойких сталей Hardox 500. Композит характеризуется широким интервалом значений предела прочности на поперечный изгиб  $R_{bm30}$  от 200 до 800 МПа. Сталь 40Х показала предел прочности на изгиб  $R_{bm30}$ , равный 1590 МПа, а сталь Hardox 500 – 2970–3020 МПа. Композит имеет низкие значения ударной вязкости  $KCU = 0,02$  МДж/м<sup>2</sup> по сравнению со значениями  $KCU = 0,35$  МДж/м<sup>2</sup> для стали 40Х и  $KCU = 1,59$  МДж/м<sup>2</sup> для стали Hardox 500. СВС-композит системы Fe–Ni–Ti–C–B не следует применять для деталей, работающих на изгиб и испытывающих ударные нагрузки, однако он отлично подойдет для защиты поверхностей деталей, подверженных интенсивному абразивному износу.

**Ключевые слова:** самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), СВС-композит, микроструктура, абразивная износостойкость, предел прочности на изгиб, ударная вязкость

### 1. Введение

Современный уровень развития техники вызывает необходимость создания новых материалов с особыми свойствами. Такими материалами являются композиты. В настоящее время у российского композитного рынка имеется большой потенциал для роста, развития и выхода на мировой уровень. Композиты с металлической матрицей и керамическим наполнителем имеют уникальные свойства, что обуславливает их широкое использование в таких отраслях промышленности, как авиастроение, судостроение, машиностроение, металлургия, энергетика и т. п. Однако получение данных композитов с использованием традиционных методов порошковой металлургии затруднено главным образом достижением высоких температур нагрева.

Самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС) является одним из перспективных методов получения новых порошковых или монокристаллических материалов [1–3].

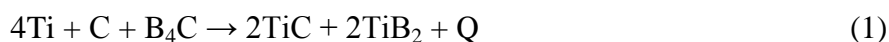
Полученные высокотемпературным синтезом композиты отличаются высокой износостойкостью и могут служить защитной поверхностью ковшей карьерных экскаваторов, дна кузовов карьерных самосвалов, скребков горнопроходческого щита, пластин транспортеров железной руды и окатышей. Процесс изготовления СВС-композитов является нестационарным. Получение двух абсолютно одинаковых композитов затруднительно, так как при малейшем изменении температуры или времени начала компактирования происходит перераспределение структурных составляющих.

В настоящее время проводятся исследования различных систем СВС-композитов [4–7]. Уже установлено, что с увеличением процентного содержания добавок Ti, Ni, Co, NiAl, Ni<sub>3</sub>Al уменьшается адиабатическая температура нагрева, снижается температура горения системы, размер зерна уменьшается, увеличивается прочность на изгиб, на сжатие и вязкость разрушения [8–11]. В статье [12] установлено, что добавление Fe в композит TiC–Fe в количестве 30 масс. % максимально повышает плотность композита. Авторы работы [4] показали, что при содержании железа и никеля в исходной порошковой смеси 70 масс. % формируется беспористый композит системы Fe–Ni–Ti–C–B. В статье [13] сообщается о получении композита системы ZrB<sub>2</sub>–CrB с пористостью 1 % при добавлении связки CrB в количестве 40 масс. %. Установлено, что увеличение этой связки до 40 масс. % повышает прочность на изгиб с 400 до 610 МПа. Изучается также и коррозионная стойкость СВС-композитов различных систем [14]. Связи структуры и свойств, установленные экспериментальными методами, помогают в изучении композитов новых систем. Традиционно проводят исследования влияния структуры и фазового состава композитов на их химические, физические, микромеханические и трибологические свойства с целью экономически или экологически выгодной замены существующих в реальных промышленных условиях технологий. В настоящее время проводятся исследования СВС-композитов различных систем, однако структура и свойства СВС-композитов с железной матрицей до сих пор недостаточно изучены. Это определяет научную новизну работы, которая заключается в исследовании износостойкости и механических свойств композита с железной матрицей, полученного методом СВС.

Цель работы – исследование износостойкости и механических свойств композита системы Fe–Ti–Ni–B–C, полученного методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза.

## 2. Материал и методика исследований

Композит системы Fe–Ti–Ni–B–C был изготовлен методом СВС по технологии, подробно описанной в патенте [15]. В качестве терморегулирующего компонента выступали порошки Ti, B<sub>4</sub>C, C и обеспечивали протекание экзотермической реакции:



Структуру полученного композита исследовали на оптическом микроскопе Neophot 21. Средний химический состав был определен с помощью сканирующего электронного микроскопа Tescan Vega II XMU с энергодисперсионной приставкой INCA Energy 450 XT по десяти участкам 2 × 2 мм. Испытания на абразивную износостойкость проводили на лабораторной установке знакопеременного движения при возвратно-поступательном скольжении плоской торцевой поверхности пальчиковых образцов композита по поверхности пластины с закрепленным на ней электрокорундовым абразивом Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с зернистостью 160 мкм и твердостью 2000 HV при постоянной нагрузке 49 Н. Скольжение торцевых поверхностей композита проходило со средней скоростью 0,175 м/с, при этом поперечное смещение образца на один двойной ход составило 0,8 мм, а путь трения – 18 м. Взвешивание образцов во время испытаний проводили на аналитических весах с точностью 0,0001 мг. Площадь образца определяли замером сторон квадрата микрометром с точностью до 0,01 мм. Рельеф поверхности раз-



рушения образцов после испытаний исследован на сканирующем микроскопе Tescan в соответствии с терминами и определениями РД 50-672-88. Шероховатость поверхности износа определяли на оптическом профилометре Wyko NT-1100 по ГОСТ 2789-73.

Испытания на поперечный изгиб проводили на сервогидравлической машине Instron по ГОСТ 20019-74 на образцах типа А. Скорость испытания составляла 0,2 мм/мин, а расстояние между осями опор – 30 мм. Предел прочности на изгиб был рассчитан по формуле

$$R_{bm} = \frac{3F \cdot l}{2l^2 \cdot b}, \quad (2)$$

где  $F$  – максимальная сила, приводящая к разрушению образца;  $l$  – расстояние между опорами;  $h$  – высота образца;  $b$  – ширина образца. Предел текучести рассчитывали по формуле

$$\sigma_{0,2} = \frac{F}{h \cdot b}. \quad (3)$$

Испытания на ударную вязкость проводились на маятниковом копре Tinius Olsen IT542M в соответствии с ГОСТ 9454-78 на образцах типа 1 с поперечным сечением 10 × 10 мм. Ударную вязкость рассчитывали по формуле

$$KCU = \frac{A}{H \cdot B}, \quad (4)$$

где  $A$  – работа удара;  $H$  – начальная высота рабочей части;  $B$  – начальная ширина образца.

Для сравнения были испытаны образцы из износостойкой и коррозионностойкой стали 40Х и высокопрочной стали Hardox 500.

### 2.1. Структура и фазовый состав СВС-композита

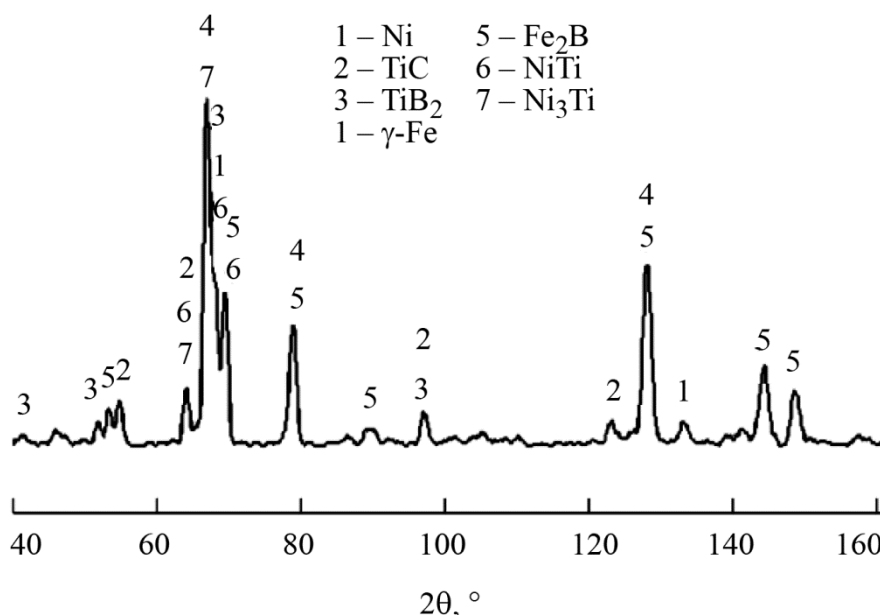


Рис. 1. Фрагмент дифрактограммы СВС-композита [4]

Фазовый состав композита был подробно изучен ранее и представлен в работе [4] (рис. 1). Матрицей композита является твердый раствор никеля в  $\gamma$ -Fe, а армирующими фазами – частицы карбида титана TiC и диборида титана TiB<sub>2</sub>, образовавшиеся в результате

СВС. В структуре композита присутствуют также частицы упрочняющих фаз, образовавшиеся в результате превращений в металлической матрице: бориды железа  $Fe_2B$  и никелиды титана  $Ni_3Ti$  и  $NiTi$ . Частицы упрочняющих фаз неравномерно распределены по объему композита (рис. 2 а). Сталь 40Х имеет перлитно-ферритную структуру с соотношением «перлит/феррит» 85/15 по шкале 7 ГОСТ 8233-56 (рис. 2 б). Перлит имеет пластинчатое строение и соответствует баллу 6 по шкале 1 ГОСТ 823-56 с межпластинчатым расстоянием 0,6 мкм. Сталь Hardox 500 имеет структуру крупноугольчатого мартенсита балла 9 по шкале 3 ГОСТ 823-56 (рис. 2 в).

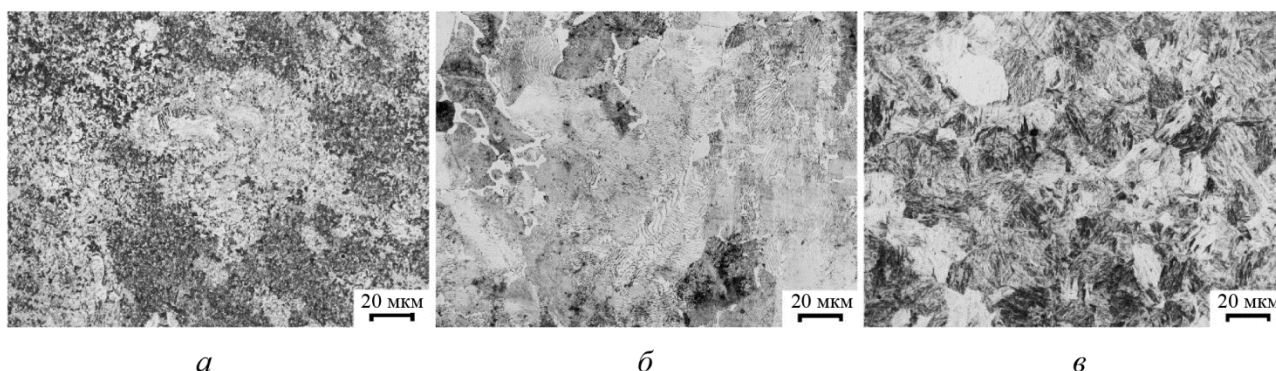


Рис. 2. Структура: СВС-композит (а); 40Х (б); Hardox 500 (в)

### 2.2. Абразивная износостойкость

В табл. 1 представлены результаты расчетов после проведенных испытаний на износостойкость. В результате относительный износ  $\epsilon$  и интенсивность изнашивания  $I_h$  СВС-композита не намного отличаются от результатов стали Hardox 500.

Таблица 1

Результаты испытаний на износостойкость

Состав	$\Delta m_{отн}, \%$	$\epsilon$	$f$	$I_h$	$W, \text{кДж/см}^3$	$R_a, \text{мкм}$
СВС-композит	1,8	1,95	0,52	4,1	12,8	1,49
	2,5	1,39	0,55	5,7	9,8	
Сталь 40Х	1,3	1	0,65	3,6	18,5	2,0
	1,3	1	0,66	3,5	19,1	
Hardox 500	1,7	1,05	0,68	4,8	14,6	1,2
	1,5	1,14	0,58	4,2	14,9	

Частицы износа стали 40Х и исследованного композита образовались по механизму скола, что свойственно абразивному износу по механизму хрупкого скола (рис. 3, 4). Частицы износа стали Hardox 500 имеют суставчатый вид, характерный для абразивного износа по механизму пластичного резания (рис. 5).

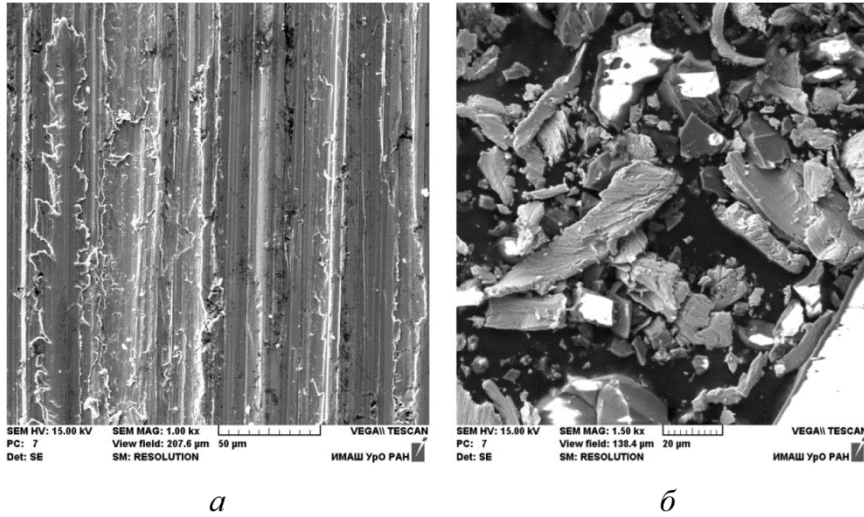


Рис. 3. Поверхность износа (а) с частицами износа (б) стали 40Х

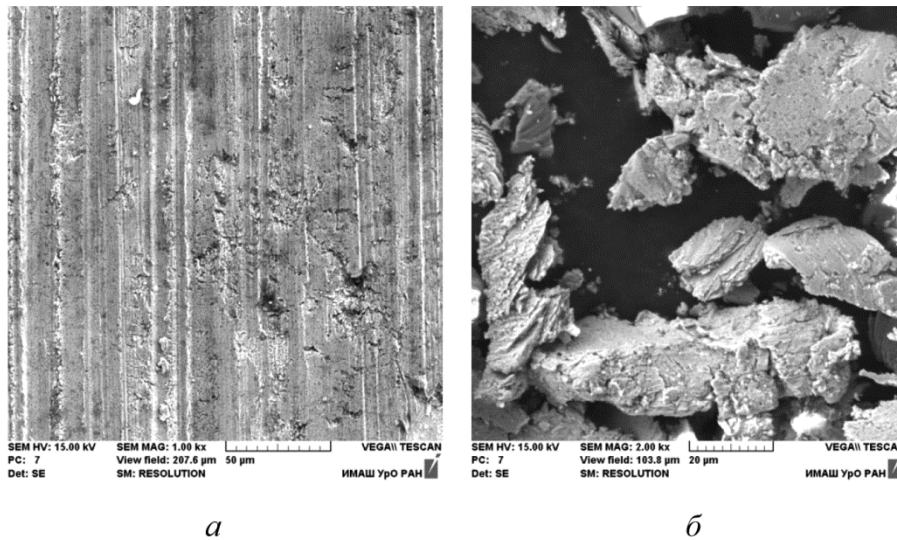


Рис. 4. Поверхность износа (а) с частицами износа (б) композита

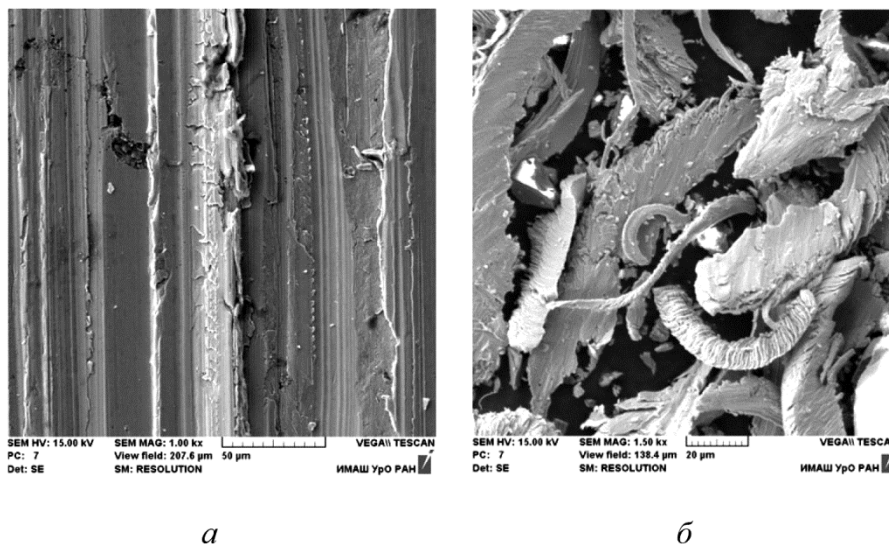


Рис. 5. Поверхность износа (а) с частицами износа (б) стали Hardox 500



В результате исследованный композит показал износостойкость ( $\varepsilon = 1,39$ ), близкую к значению этой характеристики ( $\varepsilon = 1,05$ ) для Hardox 500, одной из самых износостойких сталей. Это позволяет характеризовать СВС-композит с железной матрицей как довольно износостойкий материал.

### 2.3. Прочность на поперечный изгиб СВС-композита

В результате испытаний на поперечный изгиб образцы СВС-композита хрупко разрушились (рис. 6 а). На образцах стали 40Х появились трещины, но полного разрушения образца с разделением его на две части не наблюдали (рис. 6 б). Образцы Hardox 500 показали отличную прочность на изгиб без разрушения (рис. 6 в). По результатам испытаний композит имеет прочность на изгиб в широком интервале значений  $R_{bm30}$  от 200 до 800 МПа (табл. 2). Такой разброс значений связан с неоднородным распределением структурных составляющих в объеме композита [4], а также с наличием микродефектов в виде мелких пор, которые также неравномерно распределены. Прочность композита меньше, чем у сталей 40Х и Hardox 500 (табл. 2).

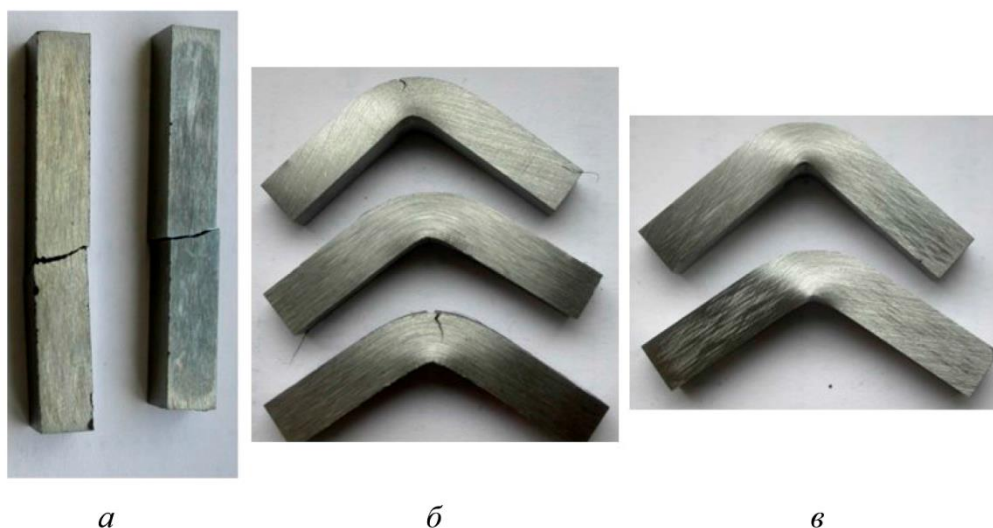


Рис. 6. Внешний вид образцов после поперечного изгиба: СВС-композит (а); 40Х (б); Hardox 500 (в)

Таблица 2

Результаты испытаний на поперечный изгиб

Материал	Высота/ширина	$R_{bm30}$ , МПа	$\delta$ , %	$\sigma_{0,2}^{изг}$ , МПа
40X	5,01/5,06	1590	16,7	660
	5,01/5,06	1590	17,0	660
	5,00/5,00	1590	16,3	650
Hardox 500	5,05/5,05	3020	12,8	2010
	5,05/5,05	2970	12,8	1960
СВС-композит	4,87/4,95	220	–	–
	4,83/4,90	800	–	–
	4,86/4,95	670	–	–

#### 2.4. Ударная вязкость СВС-композиата

По проведенным испытаниям на ударную вязкость КСЧ замечено, что сталь 40Х и композит имеют низкую ударную вязкость по сравнению со сталью Hardox 500 (табл. 3). При этом композит более хрупкий, чем сталь 40Х. Поверхность макроизлома после испытаний композита на ударную вязкость матовая, однородная, соответствует бархатистому излому (рис. 7 а). Такой излом характеризуется мелкокристаллическим строением, трудно различимым визуалью, поверхностью разрушения серого цвета с тусклым металлическим отливом, напоминающим бархат. При рассмотрении на микроуровне в изломе выявляются фасетки скола и квазискола. Бархатистый излом обычно встречается у закаленных инструментальных сталей, высокопрочных низкоотпущенных конструкционных сталей с мелкозернистой структурой в литом и деформированном состояниях. Излом стали Hardox 500 неоднородный, имеются следы сильной пластической деформации по краям образцов, так как разрушение происходило с большим усилием и высокой работой разрушения (рис. 7 б). В центральной части образца морфология поверхности разрушения имеет характер волокнисто-чешуйчатого излома. Излом стали 40Х по макрогеометрии имеет однородную блестящую поверхность (рис. 7 в). По морфологии поверхности разрушения излом является камневидным. Такой излом характеризуется грубозернистым строением и имеет место у перегретых материалов или в стали при распространении трещины по границам зерен. При рассмотрении на микроуровне выявляются фасетки межзеренного разрушения. На поверхности фасеток могут наблюдаться ямки, глубина и диаметр которых невелики.

Таблица 3

Результаты испытаний на ударную вязкость

Материал	№ образца	H, мм	h <sub>0</sub> , мм	B, мм	L, мм	S <sub>0</sub> , мм <sup>2</sup>	КСЧ, МДж/м <sup>2</sup>	A, Дж
СВС-композит	1	9,72	7,76	9,72	54,53	75,43	0,02	1,74
	2	9,73	7,76	9,72	54,56	75,43	0,02	1,56
Эталон Hardox 500	1	10,03	8,05	10,02	54,84	80,66	1,58	127,22
	2	10,04	8,09	10,02	54,85	81,06	1,52	123,25
	3	10,01	8,12	10,04	54,87	81,52	1,59	129,39
Сталь 40Х	1	9,98	8,23	9,97	54,90	82,05	0,34	27,85
	2	9,96	8,22	9,94	54,92	81,71	0,35	28,86
	3	9,96	8,16	9,95	54,85	81,19	0,32	26,14

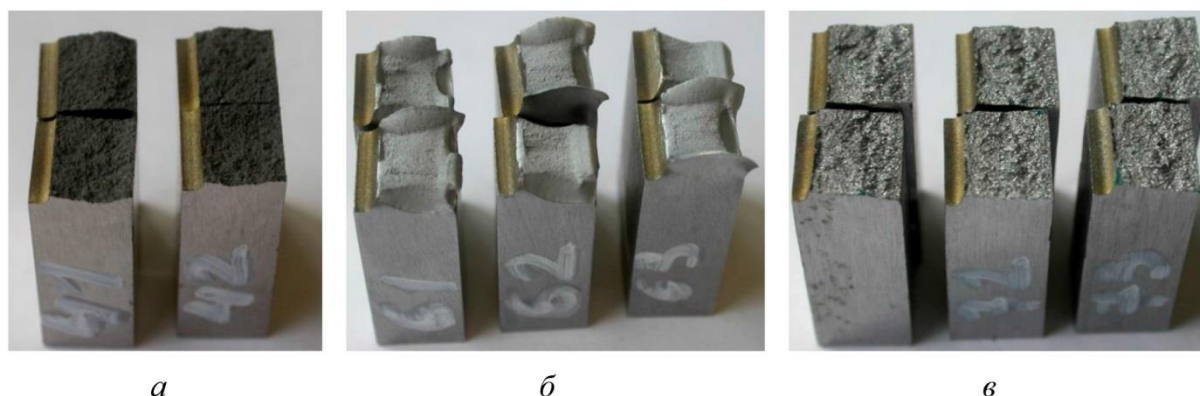


Рис. 7. Внешний вид поверхности излома образцов после поперечного изгиба: СВС-композит (а); Hardox 500 (б); 40Х (в)



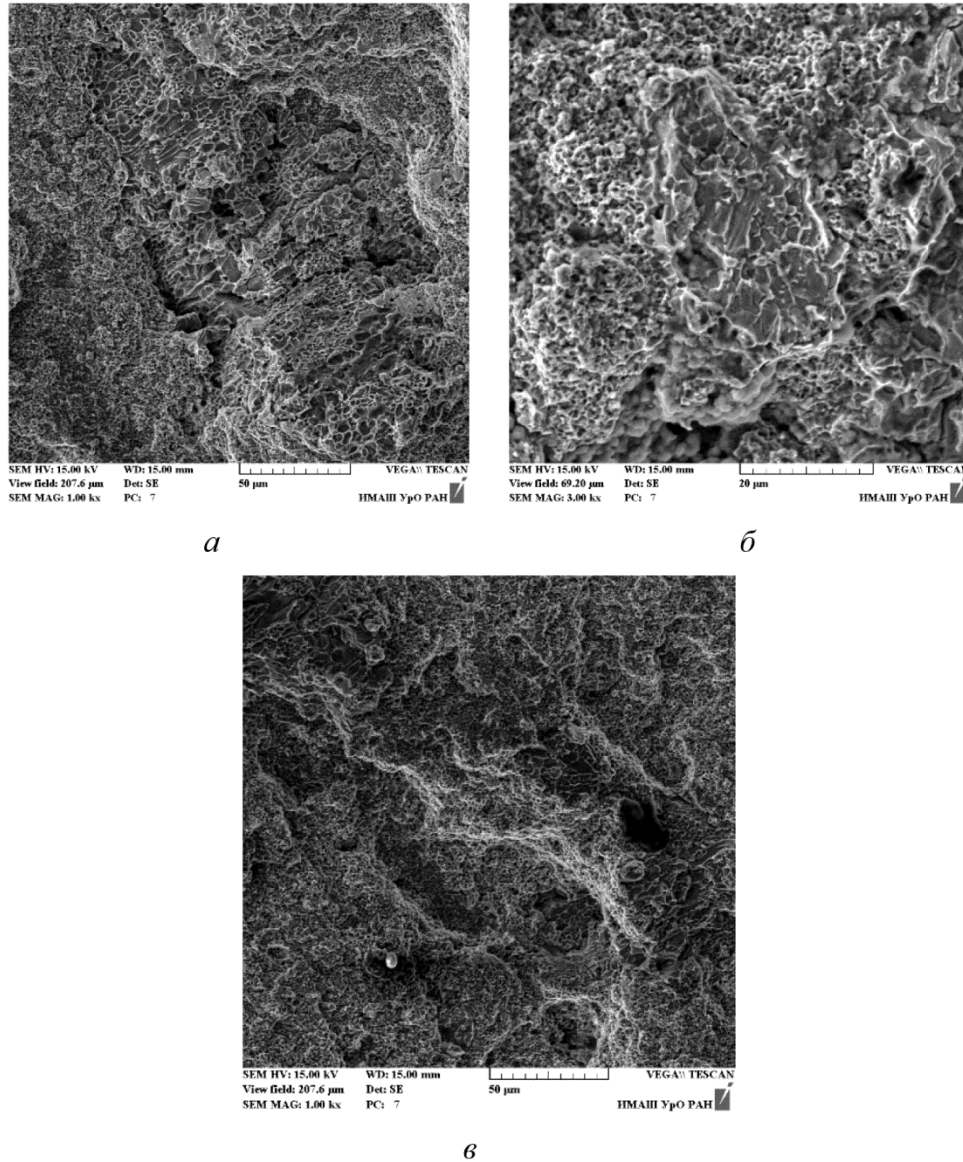


Рис. 8. Микрорельеф излома СВС-композита: сотовый рельеф (*a*); фасетки скола (*b*); гребни (*v*)

Микрорельеф изломов СВС-композита имеет вид мелких плоских ямок, называемый сотовым рельефом (рис. 8 *a*). Такой рельеф говорит о малой доле локальной пластической деформации. Также в микрорельефе замечены фасетки скола, которые характеризуют внутризеренное хрупкое разрушение (рис. 8 *b*). Кроме всего перечисленного, в микрорельефе СВС-композита присутствуют гребни (рис. 8 *v*), образующиеся в результате пластической деформации и разрушения перемычек ямок. Излом СВС-композита имеет в основном хрупкий характер разрушения с элементами вязкого. Низкая ударная вязкость, очевидно, обусловлена большим количеством упрочняющих фаз в композите, а также внутренними порами.

По результатам испытания максимальную ударную вязкость КСУ, равную 1,59 МДж/м<sup>2</sup>, показала сталь Hardox 500. В микрорельефе этого образца преобладают вытянутые глубокие ямки (рис. 9). Глубина ямок характерна для условно высокой работы разрушения (п. 2.6.3 РД 50-672-88). Такой микрорельеф характерен для вязкого излома.

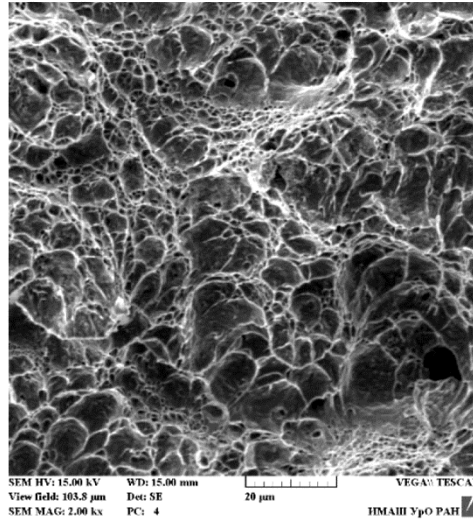
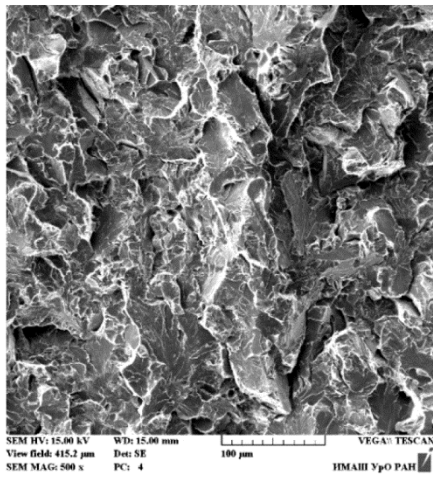
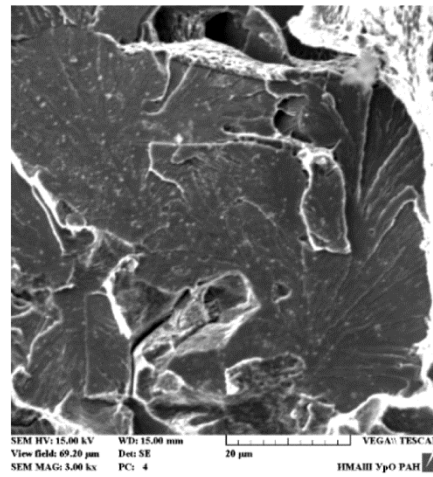


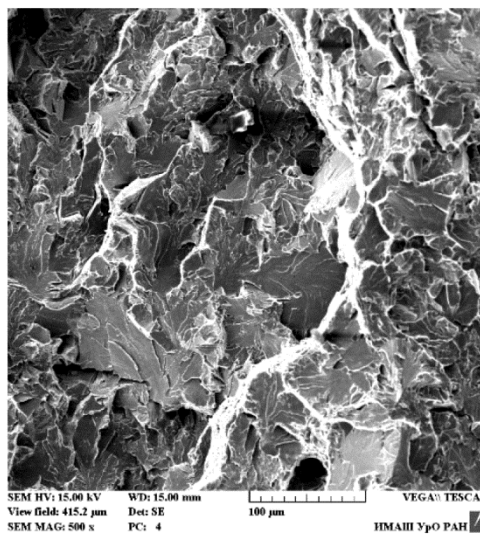
Рис. 9. Микрорельеф излома стали Hardox 500



*а*



*б*



*в*

Рис.10. Микрорельеф излома стали 40Х:  
фасетки скола (*а*); ручьистые узоры (*б*); ступеньки (*в*)

Образцы из стали 40X разрушились хрупко, тем не менее ударная вязкость KCU выше, чем у композита, и равна  $0,35 \text{ МДж/м}^2$ . Микрорельеф состоит из фасеток скола, свидетельствующих о внутризеренном хрупком разрушении (рис. 10 а). Размер фасеток скола гораздо больше, чем у композита. На поверхности фасеток имеются ручьиобразные (веерообразные) узоры (рис. 10 б). Ступеньки в микрорельефе соответствуют изменению направления роста трещин (рис. 10 в). Сталь 40X имеет хрупкий излом.

### 3. Заключение

Полученные данные в ходе испытаний на поперечный изгиб и на ударную вязкость позволяют сделать вывод о том, что СВС-композит системы Fe–Ti–Ni–B–C нельзя использовать при конструировании деталей, работающих на изгиб и испытывающих ударные нагрузки, однако он отлично подойдет для защиты поверхностей элементов конструкций, подверженных интенсивному абразивному износу. В результате испытания на износостойкость СВС-композит системы Fe–Ti–Ni–B–C продемонстрировал достаточно высокий показатель износостойкости  $\epsilon = 1,39$ , что не намного отличается от показателей одной из самых износостойких сталей – шведской стали Hardox 500.

### Благодарность

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИМАШ УрО РАН по теме № 124020700063-3.*

### Литература

1. Амосов А. П., Боровинская И. П., Мержанов А. Г. Порошковая технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза материалов. – М. : Машиностроение–1, 2007. – 472 с.
2. Мержанов А. Г. Твердопламенное горение. – Черноголовка : ИСМАН, 2000. – 238 с.
3. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: теория и практика : сборник статей / под ред. А. Е. Сычева. – Черноголовка : Территория, 2001. – 432 с.
4. The structure of SHS composites of the Fe–Ni–Ti–C–B system / N. B. Pugacheva, Yu. V. Nikolin, E. I. Senaeva, I. Yu. Malygina // Physics of Metals and Metallurgy. – 2019. – Vol. 120, No. 11. – P. 1174–1180. – DOI 10.1134/S0015323019110135.
5. Structure and properties of a SHS Cu–Ti–C–B composite / N. B. Pugacheva, Yu. V. Nikolin, T. M. Vykova, E. I. Senaeva // Physics of Metals and Metallurgy. – 2022. – Vol. 123 (1). – P. 43–49. – DOI: 10.1134/S0031918X22010100.
6. Получение металлокерамических СВС-композитов на основе механохимически обработанных систем / Н. Н. Мофа, Б. С. Садыков, А. Е. Баккара, Г. С. Журанова, З. Л. Султанова, З. А. Мансуров // Горение и плазмохимия. – 2018. – Т. 16 (3–4). – С. 159–171.
7. СВС композиционных материалов на основе сплава Ti–Co / А. Е. Сычев, О. К. Камынина, Л. М. Умаров, А. С. Щукин, М. В. Жидков // Фундаментальные исследования. – 2014. – № 12. – С. 1912–1916.
8. Self-propagating high temperature combustion synthesis of TiB/Ti composites / Z. Xinghong, X. Qiang, H. Jiecai, V. L. Kvanin // Materials Science and Engineering: A. – 2003. – Vol. 348 (1–2). – P. 41–46. – DOI: 10.1016/S0921-5093(02)00635-4.
9. Fan Q., Chai H., Jin Z. Role of iron addition in the combustion synthesis of TiC–Fe cermet // Journal of Materials Science. – 1997. – Vol. 32. – P. 4319–4323. – DOI: 10.1023/A:1018667722150.
10. LaSalvia J. C., Meyers M. A. Combustion synthesis in the Ti–C–Ni–Mo system. Part II. Analysis // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1995. – Vol. 26. – P. 3011–3019. – DOI: 10.1007/BF02669657.



11. Combustion synthesis and densification of large-scale TiC–xNi cermets / X. Zhang, X. He, J. Han, W. Qu, V. L. Kvalin // *Materials Letters*. – 2002. – Vol. 56 (3). – P. 183–187. – DOI: 10.1016/S0167-577X(02)00437-8.
12. Effect of Fe on the phases and microstructure of TiC–Fe cermets by combustion synthesis/quasi-isostatic pressing / W. Zhang, X. Zhang, J. Wang, C. Hong // *Materials Science and Engineering: A*. – 2004. – Vol. 381 (1–2). – P. 92–97. – DOI: 10.1016/j.msea.2004.04.026.
13. Синтез и свойства композитов на основе боридов циркония и хрома / В. А. Щербаков, А. Н. Грядунов, Ю. Н. Баринов, О. И. Ботвина // *Известия высших учебных заведений. Порошковая металлургия и функциональные покрытия*. – 2018. – № 1. – С. 18–25.
14. Коррозионная стойкость СВС- металлокерамического композита Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>–30об. % TiN в тройной смеси серная кислота–фосфорная кислота–вода / А. Г. Манучарян, С. Л. Киканян, Э. А. Хачатрян // *Молодой ученый*. – 2014. – № 2 (61). – С. 260–263.
15. Патент № 2680489 Рос. Федерация. Способ изготовления многослойной износостойкой пластины : № 2017139013 : заявл. 10.11.2017 : опубл. 21.02.2019 / Николин Ю. В., Матвоян М. Б., Кочугов С. П., Пугачева Н. Б. – 11 с.

**Received:** 11.04.2024

**Revised:** 10.06.2024



**Accepted:** 16.08.2024



**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.4.070-082

## STUDYING THE HEAT TRANSFER PROCESS IN A POROUS MEDIUM WITH A FISCHER–KOCH S TPMS STRUCTURE

K. V. Gubareva<sup>a, \*</sup> and A. V. Eremin<sup>b</sup>

*Samara State Technical University, 244 Molodogvardeyskaya St., Samara, 443100, Russia*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9845-8372>  [r.kristina2017@mail.ru](mailto:r.kristina2017@mail.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2614-6329>  [a.v.eremin@list.ru](mailto:a.v.eremin@list.ru)

\*Corresponding author. E-mail: [r.kristina2017@mail.ru](mailto:r.kristina2017@mail.ru)

Address for correspondence: ul. Molodogvardeyskaya, 244, Samara, 443100, Russia

Tel.: +7 (846) 332-4226

The paper reports a study of the process of heat transfer in a porous medium with internal heat sources. A model material is considered, which is a porous plate formed by Fischer–Koch S elementary cells, with a topology of triply periodic minimal surfaces. The results of solving the boundary value problem of thermal conductivity in a thin plate under symmetric boundary conditions of the first kind are presented. The developed numerical-analytical method is used to obtain a simple solution to the problem, taking into account the topological features of the material. Computational homogenization methods based on computer-aided engineering simulation in the Ansys software are used to determine the transfer coefficients and thermophysical properties of the area under study. The paper presents graphs of temperature distribution in a porous plate at different times and compares the obtained analytical solutions with numerical ones. The results of the study can be used in designing thermal protection of heat-generating equipment, heat and mass transfer paths in thermal and mechanical equipment, etc. The solutions are presented in a simple analytical form; this enables them to be used by a wide range of researchers and engineers and does not require using expensive software and hardware.

**Keywords:** effective thermal conductivity, triply periodic minimum Fischer–Koch surface, additional unknown function, additional boundary characteristics, ordered macrostructure, porous material, heat transfer

### Acknowledgment

*The study was supported by a grant from the Russian Science Foundation (RSF), No. 23-79-10044, <https://rscf.ru/project/23-79-10044/>. The use of Ansys in Samara State Technical University was licensed under agreement E11127/21 dated 04 October 2021.*

### References

1. Murzakova, A.R., Shayakhmetov, U.Sh., Vasin, K.A., and Bakunov, V.S. Developing a technology for the production of an effective porous structural heat and sound insulator. *Stroitelnye Materialy*, 2011, 5, 65–67. (In Russian).
2. Omarov, A.O. Substantiation of efficiency criteria of materials for rational enclosing structures and description of technology of efficient structural and heat-insulating cellular concrete on porous aggregates. *Vestnik Evraziyskoy Nauki*, 2021, 1, Available at: <https://esj.today/PDF/10SAVN121.pdf>. (In Russian).



3. Prokhorchuk, E.A., Leonov, A.A., Vlasova, K.A., Trapeznikov, A.V., Nikitin, V.I., and Nikitin, K.V. Prospects for the use of hot isostatic pressing in cast aluminum alloys (review). *Trudy VIAM*, 2021, 12 (106), 21–30. DOI: 10.18577/2307-6046-2021-0-12-21-30. (In Russian).
4. Izzheurov, E.A. and Uglanov, D.A. Obliteration's problems in capillary-porous structures of aerospace hydro systems' parts. *Vestnik Samarskogo universiteta. Aerokosmicheskaya Tekhnika, Tekhnologii, Mashinostroenie*, 2009, 3 (19), 143–146. (In Russian).
5. Alifanov, O.M., Salosina, M.O., Budnik, S.A., and Nenarokomov, A.V. Design of aerospace vehicles' thermal protection based on heat-insulating materials with optimal structure. *Aerospace*, 2023, 10 (7), 629. DOI: 10.3390/aerospace10070629.
6. Rydalina, N. V., Aksenov, B. G., Stepanov, O. A., and Antonova, E. O. Application of porous materials in heat exchangers of heat supply system. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy. Problemy Energetiki*, 2020, 22 (3), 3–13. (In Russian). DOI: 10.30724/1998-9903-2020-22-3-3-13.
7. Rydalina, N.V., Stepanov, O.A., and Antonova, E.O. Application of porous metals in the designs of heat exchangers. *Vestnik Evraziyskoy Nauki*, 2023, 15 (1). (In Russian). Available at: <https://esj.today/PDF/24SAVN123.pdf>
8. Son, E.E. Damper systems for the high voltage equipment protection by porous metals. *Izvestiya RAN. Energetika*, 2019, 6, 78–109. (In Russian). DOI: 10.1134/S0002331019060098.
9. Andrianov, I.V., Kalamkarov, A.L., and Starushenko, G.A. Analytical expressions for effective thermal conductivity of composite materials with inclusions of square cross-section. *Composites. Part B: Engineering*, 2013, 50, 44–53. DOI: 10.1016/j.compositesb.2013.01.023.
10. Bragin, D.M., Popov, A.I., Ivannikov, Yu.N., Eremin, A.V., Zinina, S.A., and Kechin, N.N. Experimental study of effective thermal conductivity of materials based on TPMS. In: *The 5th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA)*, IEEE, Lipetsk, Russian Federation, 2023, pp. 983–985. DOI: 10.1109/SUMMA60232.2023.10349385.
11. Prosviryakov, E.Yu. Gravitational Principle of minimum pressure for incompressible flows. *Diagnosics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2021, 2, 22–29. DOI: 10.17804/2410-9908.2021.2.022-029. Available at: [http://dream-journal.org/issues/content/article\\_315.html](http://dream-journal.org/issues/content/article_315.html)
12. Gorshkov, A.V. and Prosviryakov, E.Yu. Analytical study of the Ekman angle for the Benard–Marangoni convective flow of viscous incompressible fluid. *Diagnosics, Resource and Mechanics of materials and structures*, 2021, 4, 34–48. DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.34-49. Available at: [http://dream-journal.org/issues/2021-4/2021-4\\_340.html](http://dream-journal.org/issues/2021-4/2021-4_340.html)
13. Fischer, W. and Koch, E. Spanning minimal surfaces. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 1996, 354 (1715), 2105–2142. DOI: 10.1098/rsta.1996.0094.
14. Lykov, A.V. *Teoriya teploprovodnosti* [Theory of Thermal Conductivity]. Vysshaya Shkola Publ., Moscow, 1967, 600 p. (In Russian).
15. Bragin, D.M., Eremin, A.V., Popov, A.I., and Shulga A.S. Method to determine effective thermal conductivity coefficient of porous material based on minimum surface Schoen's I-WP(R) type *Vestnik IGEU*, 2023, 2, 61–68. (In Russian). DOI: 10.17588/2072-2672.2023.2.061-068.
16. Popov, A.I., Bragin, D.M., Zinina, S.A., Eremin, A.V., and Olatuyi O.J. Determination of the effective thermal conductivity of a porous material with an ordered structure based on I-WP TPMS. *Mezhdunarodnyi Zhurnal Informatsionnykh Tekhnologiy i Energoeffektivnosti*, 2022, 7, 3–1 (25), 61–67. (In Russian).
17. Eremin, A.V., Gubareva, K.V., Popov, A.I. Investigation of the temperature state of fuel elements with a given spatial distribution of heat sources. *AIP Conf. Proc.*, 2022, 2456, 020015. DOI: 10.1063/5.0074727.
18. Kudinov, I.V., Kotova, E.V., and Kudinov, V.A. A method for obtaining analytical solutions to boundary value problems by defining additional boundary conditions and additional sought-for functions. *Numerical Analysis and Applications*, 2019, 12 (2), 126–136. DOI: 10.1134/S1995423919020034.

19. Kudinov, V.A., Eremin, A.V., and Stefanyuk, E.V. Analytical solutions of heat-conduction problems with time-varying heat-transfer coefficients. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2015, 88 (3), 688–698. DOI: 10.1007/s10891-015-1238-y.
20. Kudinov, V.A., Kartashov, E.M., and Kalashnikov V.V. *Analiticheskie resheniya zadach teplomassoperenosa i termouprugosti dlya mnogosloynnykh konstruktsyi* [Analytical Solutions of Problem of Heat and Mass Transfer and Thermoelasticity for Multilayered Structures: Educational Book]. Vysshaya Shkola Publ., Moscow, 2005, 430 p. (In Russian).

Подана в журнал: 11.04.2024



УДК 536.21



DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.070-082

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ СО СТРУКТУРОЙ ТПМП ФИШЕРА – КОХА S

К. В. Губарева<sup>a, \*</sup>, А. В. Еремин<sup>b</sup>

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Самарский государственный технический университет»,  
ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100, Россия*

<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9845-8372>  [r.kristina2017@mail.ru](mailto:r.kristina2017@mail.ru);

<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2614-6329>  [a.v.eremin@list.ru](mailto:a.v.eremin@list.ru)

\*Ответственный автор. Электронная почта: [r.kristina2017@mail.ru](mailto:r.kristina2017@mail.ru)  
Адрес для переписки: ул. Молодогвардейская, 244, Самара, 443100, Россия  
Тел.: +7 (846) 332-42-26

В работе выполнено исследование процесса переноса тепла в пористой среде с внутренними источниками тепла. Рассматривается модельный материал – пористая пластина с топологией трижды периодических минимальных поверхностей, образованная элементарными ячейками типа Фишера – Коха S. В статье приведены результаты решения краевой задачи теплопроводности в тонкой пластине при симметричных граничных условиях первого рода. С использованием разработанного численно-аналитического метода получено простое по форме решение задачи с учетом топологических особенностей материала. При определении коэффициентов переноса и теплофизических свойств исследуемой области использованы методы вычислительной гомогенизации среды на основе CAE-моделирования в программном комплексе Ansys. В статье приведены графики распределения температуры в пористой пластине в различные моменты времени, выполнено сравнение полученных аналитических решений с численными. Результаты работы могут быть использованы при проектировании тепловой защиты тепловыделяющего оборудования, теплообменных трактов тепломеханического оборудования и др. Решения представлены в простом аналитическом виде, что делает возможным их использование широким кругом исследователей, инженеров и не требует использования дорогостоящего программного обеспечения и вычислительной техники.

**Ключевые слова:** эффективная теплопроводность, трижды периодическая минимальная поверхность Фишера – Коха, дополнительная искомая функция, дополнительные граничные характеристики, упорядоченная макроструктура, пористый материал, перенос тепла

### 1. Введение

В большинстве случаев пористые материалы представляют собой твердотельный каркас с газовыми каналами, полостями различной формы. Такие материалы широко используются во многих отраслях промышленности благодаря своим уникальным свойствам: в строительной отрасли пористые материалы используются для изготовления легких бетонов, экструдированного пенополистирола и др. Они обладают низкой плотностью, хорошими теплоизоляционными свойствами, что делает их идеальными для строительства зданий с низким энергопотреблением [1–2]. В аэрокосмической промышленности пористые материалы используются для изготовления теплоизоляционных материалов или облегчения веса конструкций [3–5]. В энергетической промышленности – в качестве рабочей зоны фильтров, сепараторов, теплообменных устройств и т. д. [6–8].

Изучение теплофизических характеристик материалов с пористой структурой является важной задачей теоретической и прикладной теплотехники. Свойства таких материалов существенно зависят от геометрических и топологических характеристик пор, свойств материала каркаса и заполнителя порового пространства. Одной из ключевых особенностей пористых материалов является их большая поверхность, которая способствует увеличению теплового, гидрогазодинамического сопротивления, влияет на теплоотдачу и теплопроводность материала. Понимание закономерностей теплопереноса в пористых материалах позволяет оптимизировать их использование в различных технических приложениях. Моделирование теплопереноса в пористых материалах требует учета зависимости теплофизических свойств от температуры. Это приводит к необходимости решения сложных, в том числе нелинейных, дифференциальных уравнений в частных производных, а также их систем.

Решению задач переноса (тепла, массы, импульса) в пористых средах посвящены работы многих авторов. Разрабатываются новые точные и численные методы их решения [9–12], новые технологии изготовления пористых материалов, улучшаются физико-механические свойства и т. д. Одним из наиболее перспективных направлений развития данной темы является разработка теоретических основ прогнозирования физических свойств пористых материалов с упорядоченной структурой. Наибольший интерес вызывают пористые материалы на основе трижды периодических поверхностей минимальной энергии. Эти поверхности используются при создании материалов с пористой структурой, таких как фильтры, мембраны и другие. Особенностью этих поверхностей является то, что их свойства можно прогнозировать на основе основных геометрических характеристик, таких как толщина стенки элементарной ячейки, размер ячейки и др. Например, при увеличении пористости такого материала его термическое сопротивление возрастает, а при уменьшении увеличивается прочность конструкции. Это позволяет заранее определить свойства материала и оптимизировать его параметры для конкретной задачи.

## 2. Постановка задачи и методы решения

В настоящей работе рассмотрена задача теплопроводности в пористой пластине с внутренним источником теплоты при симметричных граничных условиях первого рода, структура которой основана на трижды периодических минимальных поверхностях (ТПМП) типа Фишера – Коха S [13] с толщиной стенки  $2l$  (рис. 1).

Пористость элементарной ячейки  $\varphi$  зависит от геометрических параметров (толщины стенки ячейки  $\delta$  и длины ребра куба  $b$ , в который вписана ячейка) и определяется с помощью вычислений в модуле SpaceClaim ПК Ansys (рис. 2). Таким образом, пористость определяется выражением

$$\varphi = 1 - \frac{V_{\text{ТПМП}}}{V}, \quad (1)$$

где  $V_{\text{ТПМП}}$  – объем элементарной ячейки;  $V$  – объем куба, в который вписана ячейка.

Аппроксимируя полученные результаты, получаем выражение

$$\varphi = 1 - 5,0735 \cdot \Delta, \quad (2)$$

где  $\Delta$  – относительная толщина,  $\Delta = \delta/b$ .

Математическая постановка данной задачи с учетом симметрии пластины (для половины пластины) имеет вид [14]

$$\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\lambda}{c \cdot \rho} \frac{\partial^2 T(x, \tau)}{\partial x^2} + q_v, \quad (0 \leq x \leq l; \tau > 0); \quad (3)$$

$$T(x,0) = T_0; \quad (4)$$

$$T(l, \tau) = T_{ст}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial T(0, \tau)}{\partial x} = 0; \quad (6)$$

где  $T$  – температура, К;  $c$  – теплоемкость, Дж/(кг·°С);  $\rho$  – плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $\tau$  – время, с;  $x$  – координата, м;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К);  $q_V$  – мощность внутреннего источника теплоты, Вт/м<sup>3</sup>;  $T_{ст}$  – температура стенки, К;  $T_0$  – начальная температура, К. В соответствии с задачей (3) – (6) на одной из граней исследуемой ячейки задается граничное условие первого рода  $T_{ст}$ , а на всех остальных – отсутствие теплообмена.

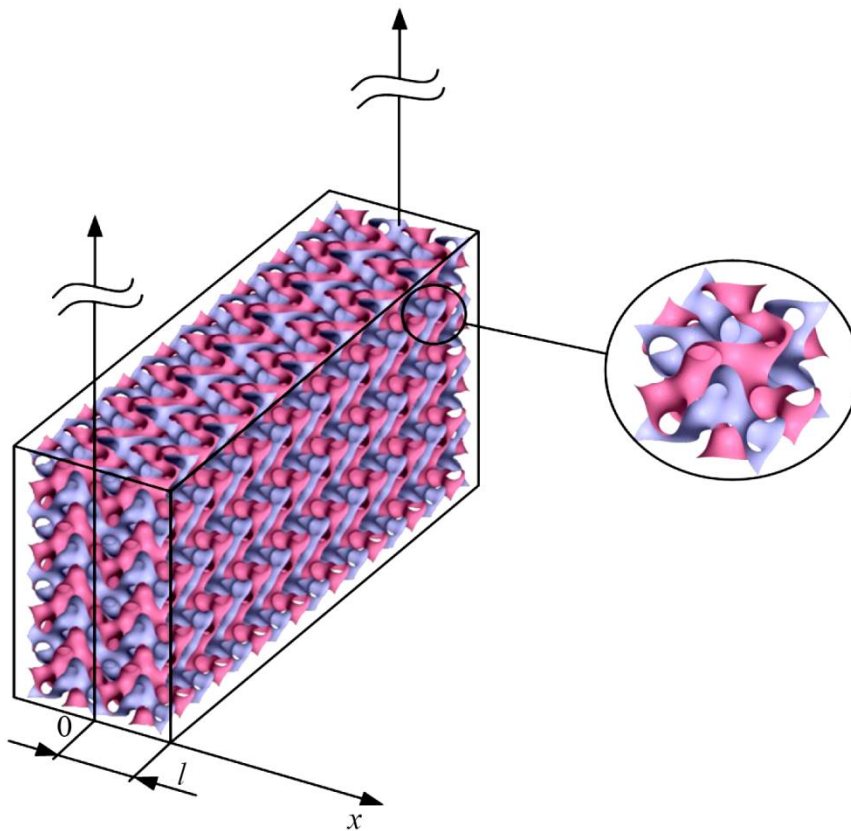


Рис. 1. Пористая пластина на основе ТПМП Фишера – Коха S

С целью осреднения теплофизических свойств материала выполнена вычислительная «гомогенизация среды» на основе метода минимального репрезентативного объема [15].

Следуя данному методу, уравнение (3) запишем в виде

$$\frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\lambda_{eff}}{c \cdot \rho_{eff}} \frac{\partial^2 T(x, \tau)}{\partial x^2} + q_V, \quad (7)$$

где  $c_{eff}$  ( $c_{eff} = c$ ),  $\rho_{eff}$ ,  $\lambda_{eff}$  – эффективные (осредненные) коэффициенты теплоемкости, плотности и теплопроводности гомогенизированной среды соответственно.



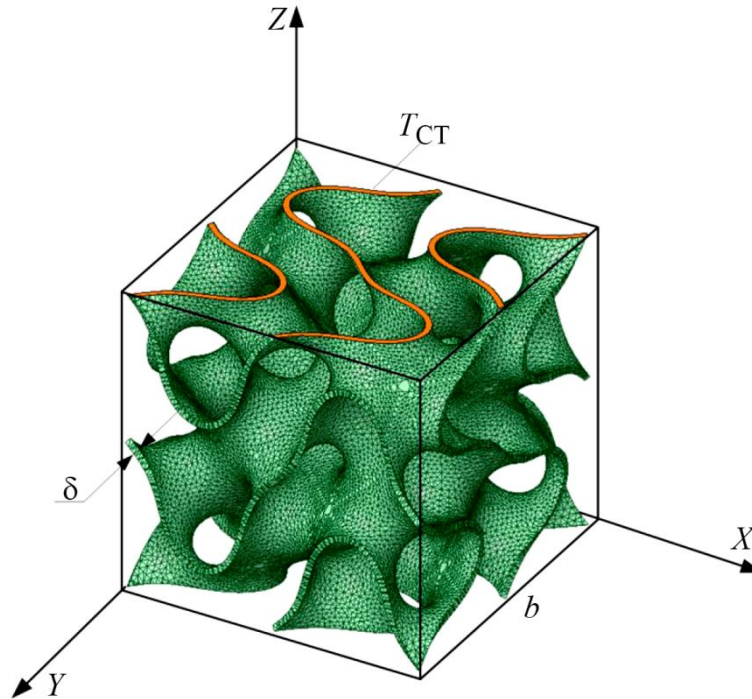


Рис. 2. Расчетная геометрия твердотельной модели ТПМП Фишера – Коха S

Плотность пористого материала  $\rho_{eff}$  определяется зависимостью от пористости  $\varphi$ :

$$\rho_{eff} = \rho_s \cdot (1 - \varphi), \quad (8)$$

где  $\rho_s$  – истинное значение плотности материала каркаса, из которого изготовлена пористая структура.

Эффективный коэффициент теплопроводности  $\lambda_{eff}$  определяется следующей линейной зависимостью:

$$\lambda_{eff} = \lambda_s \cdot 0,73 \cdot (1 - \varphi), \quad (9)$$

где  $\lambda_s$  – коэффициент теплопроводности материала твердотельного каркаса [14].

С учетом (8) можно записать:

$$c\rho_{eff} = c\rho_s \cdot (1 - \varphi) = \frac{\lambda_s}{a_s} \cdot (1 - \varphi), \quad (10)$$

где  $a_s = \frac{\lambda_s}{c\rho_s}$ .

С учетом (10) уравнение (3) примет вид

$$\frac{\lambda_s \cdot (1 - \varphi)}{a_s \cdot \lambda_{eff}} \frac{\partial T(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 T(x, \tau)}{\partial x^2} + \frac{q_V}{\lambda_{eff}}; \quad (11)$$

Выполним параметризацию уравнения (3). Введем следующие переменные и параметры:

$$\xi = \frac{x}{L}; \quad \Theta = \frac{T - T_0}{T_{CT} - T_0}; \quad Fo = \frac{a_s \tau}{L^2}; \quad Po = \frac{q_v L^2}{\lambda_{eff} \cdot A \cdot (T_{CT} - T_0)}; \quad A = \frac{\lambda_s}{\lambda_{eff}}.$$

Здесь  $\Theta$  – безразмерная температура;  $\xi$  – безразмерная координата;  $L$  – линейный размер ячейки (длина ребра куба), м;  $Fo$  – критерий Фурье (безразмерное время);  $Po$  – критерий Померанцева;  $A$  – коэффициент, зависящий от тепловых свойств материала твердотельного каркаса и эффективного коэффициента теплопроводности.

С учетом введенных обозначений уравнение (3) имеет следующий вид (см. рис. 3):

$$A \cdot (1 - \varphi) \cdot \frac{\partial \Theta(\xi, Fo)}{\partial Fo} = \frac{\partial^2 \Theta(\xi, Fo)}{\partial \xi^2} + Po \cdot A. \quad (12)$$

Решение уравнения (12) отыскивается в области  $0 < \xi < 1$ . Граничные условия (4) – (6) могут быть представлены в безразмерном виде:

$$\Theta(\xi, 0) = 0; \quad (13)$$

$$\Theta(1, Fo) = 1; \quad (14)$$

$$\frac{\partial \Theta(0, Fo)}{\partial \xi} = 0. \quad (15)$$

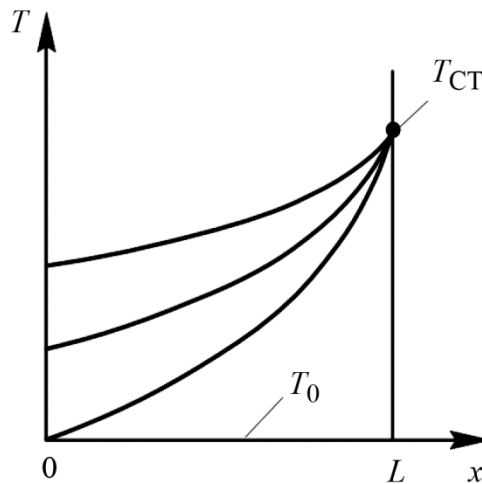


Рис. 3. График теплообмена

В соответствии с методом, описанным в работах [17–19], введем в рассмотрение новую искомую функцию времени

$$\sigma(Fo) = \Theta(0, Fo), \quad (16)$$

где  $\sigma(Fo)$  – закон изменения температуры в центре пластины ( $\xi = 0$ ) во времени.

Решение задачи (12)–(15) отыскивается в виде алгебраического полинома:

$$\Theta(\xi, Fo) = \sum_{i=1}^n b_i(Fo) \cdot \xi^{i-1}, \quad (17)$$

где  $n$  – число членов ряда (17);  $b_i(Fo)$  – неизвестные коэффициенты, зависящие от безразмерного времени.

Для получения решения задачи (12)–(15) в первом приближении ограничимся тремя слагаемыми в выражении (17). Для определения неизвестных коэффициентов  $b_i(Fo)$  подставим выражение (17) в граничные условия (14) и (15), а также в дополнительное условие (16). В результате подстановки получим систему трех алгебраических уравнений

$$\begin{cases} b_1 = \sigma(Fo); \\ b_2 = 0; \\ b_1 + b_2 + b_3 = 1. \end{cases}$$

Из решения системы находим:

$$b_1(Fo) = \sigma(Fo);$$

$$b_2(Fo) = 0;$$

$$b_3(Fo) = 1 - \sigma(Fo).$$

Выражение (17) с учетом найденных коэффициентов запишется в виде

$$\Theta(\xi, Fo) = f_1(\xi) \cdot \sigma(Fo) + \xi^2, \quad (18)$$

где  $f_1(\xi) = 1 - \xi^2$  – координатная функция. Полученное соотношение удовлетворяет граничным условиям (14), (15), а также дополнительному условию (16) при любых значениях функции  $\varphi(Fo)$ .

Для приближенного удовлетворения исходного дифференциального уравнения (12) проинтегрируем его в пределах изменения пространственной координаты, т. е. составим интеграл теплового баланса [20]:

$$\int_0^1 \left( A \cdot (1 - \varphi) \cdot \frac{\partial \Theta}{\partial Fo} \right) d\xi = \int_0^1 \left( \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + Po \cdot A \right) d\xi. \quad (19)$$

Вычисляя интеграл, получаем обыкновенное дифференциальное уравнение вида

$$\frac{d\sigma(Fo)}{dFo} \cdot \left( \frac{2A}{3} \cdot (1 - \varphi) \right) + 2 \cdot \sigma(Fo) - A \cdot Po - 2 = 0, \quad (20)$$

из решения которого находим

$$\sigma(Fo) = \frac{C_1 \cdot e^{\frac{-3Fo}{A(1-\varphi)}}}{2} + \frac{A \cdot Po}{2} + 1, \quad (21)$$

где  $C_1$  – константа интегрирования.

Подставляя (21) в (18), получаем

$$\Theta(\xi, Fo) = f_1(\xi) \left( \frac{C_1 \cdot e^{\frac{-3Fo}{A(1-\varphi)}}}{2} + \frac{A \cdot Po}{2} + 1 \right) + \xi^2. \quad (22)$$

Для выполнения начального условия (13) составим его невязку и потребуем ортогональности невязки к координатной функции  $f_1(\xi)$ :

$$\int_0^1 [\Theta(\xi, 0)] f_1(\xi) d\xi = 4 \cdot C_1 + 4 \cdot A \cdot Po + 10 = 0. \quad (23)$$

Из решения уравнения (23) определим константу интегрирования  $C_1 = -A \cdot Po - \frac{5}{2}$ .

Выражение (18) с учетом найденного значения представляет решение задачи (12)–(15) в первом приближении и может быть записано в виде

$$\Theta(\xi, Fo) = (\xi^2 - 1) \left[ \frac{e^{\frac{-3Fo}{A(1-\varphi)}} \cdot (2 \cdot A \cdot Po + 5)}{4} - \frac{A \cdot Po}{2} \right] + 1. \quad (24)$$

Для дальнейшего повышения точности необходимо увеличивать число членов ряда (17). Так, в третьем приближении будем использовать девять членов ряда, в четвертом – двенадцать и так далее. Для нахождения неизвестных коэффициентов необходимо использовать дополнительные граничные условия, физический смысл которых состоит в выполнении исходного дифференциального уравнения (12) и выражений, полученных после его дифференцирования в точках  $\xi = 0$  и  $\xi = 1$ .

С целью оценки точности полученного приближенно-аналитического решения выполнены численные решения рассматриваемой задачи методом конечных разностей в ПО MathCAD и методом конечных элементов в ПК Ansys. Используя явную схему аппроксимации дифференциальных операторов, находим дискретное решение задачи (12)–(15) на пространственно-временной сетке:

$$\xi_j = j\Delta\xi; \quad j = \overline{0, J}; \quad \tau_i = i\Delta\tau; \quad i = \overline{0, I}, \quad (25)$$

где  $J, I$  – число шагов по координате  $\xi$  и времени  $\tau$  соответственно.

В модуле Transient Thermal ПК Ansys в соответствии с задачей (12)–(15) на одной из граней элементарной ячейки задается граничное условие первого рода  $T_{ст}$ , а на всех остальных – отсутствие теплообмена. Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры устанавливается в соответствии с выражением (9). Конечно-элементная сетка для решения задачи состоит примерно из 2 млн элементов. Решение задачи теплопроводности в пористой плоской пластине выполнено при толщине стенки 0,0002 м. Температура в начальный момент времени принимается  $T_0 = 0^\circ\text{C}$ , а температура на поверхности пластины  $T_{ст} = 100^\circ\text{C}$ . Мощность внутреннего источника теплоты составляет  $200 \text{ Вт/м}^3$ . Пористая пластина состоит из элементарных ячеек типа Фишера – Коха S и изготовлена из пластика PETG с использованием FDM-печати. Для расчетов приняты следующие свойства материала [14]: теплоемкость –  $1050 \text{ Дж/(кг}\cdot^\circ\text{C)}$ ; плотность –  $1300 \text{ кг/м}^3$ ; теплопроводность –  $0,2 \text{ Вт/(м}\cdot^\circ\text{C)}$ .



### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 4 представлены результаты расчетов, полученные несколькими методами: приближенно-аналитическим (расчет по формуле (17) во втором приближении), методом конечных разностей и методом конечных элементов. Анализ результатов позволяет сделать вывод об удовлетворительном совпадении безразмерных температур, полученных всеми методами.

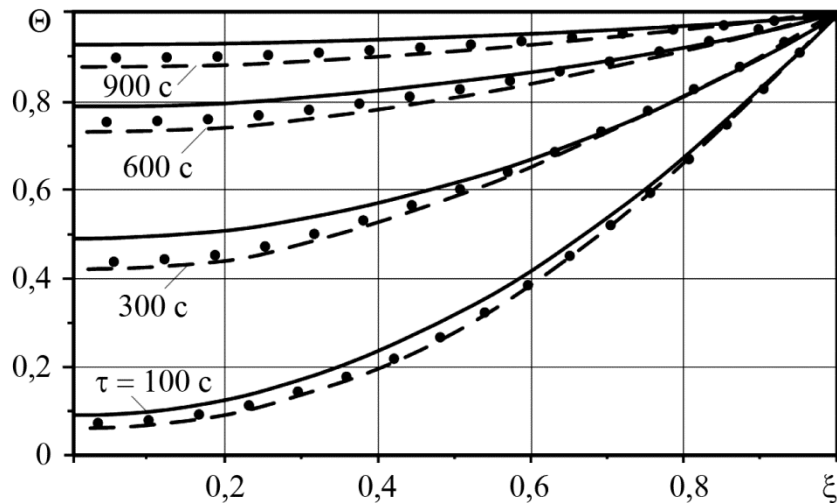


Рис. 4. Распределение температуры по координате при  $\phi = 0,89$  и  $Po = 0,001$ :  
— — расчет по формуле (17) (второе приближение); - - - - решение по методу конечных разностей (MathCAD);  $\circ \circ \circ \circ$  – решение по методу конечных элементов (Ansys)

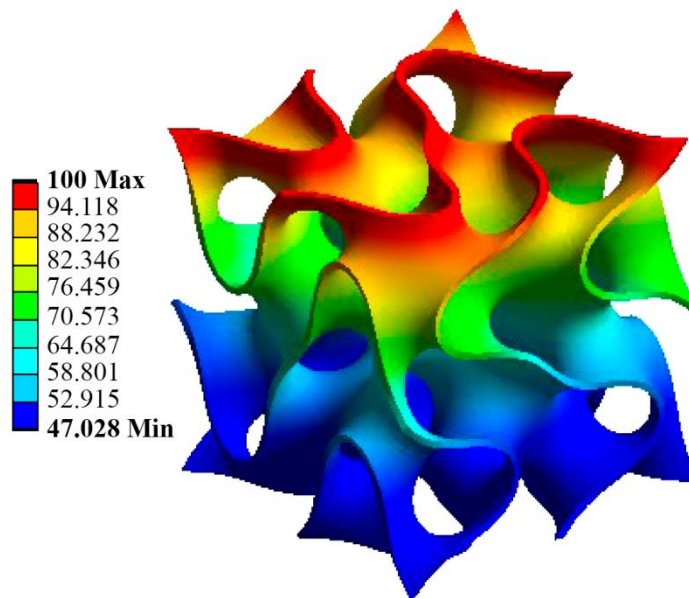


Рис. 5. Распределение температуры в элементарной ячейке Фишера – Коха S

Путем анализа вычислительных экспериментов установлено, что ТПМП-ячейка типа Фишера – Коха S сохраняет структуру (не происходит внутренних пересечений, полного заполнения пор и др.) в диапазоне толщины стенки  $0 < \delta \leq 0,0019$  м. С учетом зависимости (2) область допустимых значений пористости составляет  $0,26 < \phi \leq 1$ . Для указанных значений  $\delta$  и  $\phi$  распределение температуры по координате практически не зависит от геометрических характеристик ячейки.

В результате решения задачи методом конечных элементов были получены контуры распределения температуры в исследуемой ячейке (рис. 5).

#### 4. Заключение

Получено простое по форме аналитическое решение задачи переноса тепла через плоскую пористую стенку, структура которой основана на ТПМП типа Фишера – Коха S. Полученные выражения для определения температурной функции позволяют без использования специализированного ПО и вычислительной техники находить распределение температур внутри пористых материалов, определять тепловые потери и т. д.

С целью верификации приближенно-аналитического метода решения задачи теплопереноса в пористой среде, основанной на ТПМП типа Фишера – Коха S, выполнено сравнение результатов расчетов температурной функции во втором приближении с результатами, полученными методами конечных разностей и конечных элементов. Погрешность вычислений во втором приближении по сравнению с численными методами не превышает 4 % (по норме Чебышева) в диапазоне времени  $\tau \geq 700$  с.

Полученные результаты могут быть использованы для определения эффективной теплопроводности пористых материалов на основе ТПМП, температурных полей и тепловых потоков внутри пористых сред при одномерном переносе тепла.

#### Благодарность

*Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10044, <https://rscf.ru/project/23-79-10044/>. Лицензия на использование Ansys в ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» предоставлена в рамках договора ЕП127/21 от 04.10.2021 г.*

#### Литература

1. Разработка технологии получения эффективного строительного пористого тепло- и звукоизоляционного конструкционного материала / А. Р. Мурзакова, У. Ш. Шаяхметов, К. А. Васин, В. С. Бакунов // Строительные материалы. – 2011. – № 5. – С. 65–67.
2. Омаров А. О. Обоснование критериев эффективности материалов для рациональных ограждающих конструкций и описание технологии эффективных конструкционно-теплоизоляционных ячеистых бетонов на пористых заполнителях // Вестник Евразийской науки. – 2021. – №1. – URL: <https://esj.today/PDF/10SAVN121.pdf>
3. Перспектива применения пеноалюминия для изделий авиакосмической техники (обзор) / Е. А. Прохорчук, А. А. Леонов, К. А. Власова, А. В. Трапезников, В. И. Никитин, К. В. Никитин // Труды ВИАМ. – 2021. – № 12 (106). – С. 21–30. – DOI: 10.18577/2307-6046-2021-0-12-21-30.
4. Изжеуров Е. А., Угланов Д. А. Проблемы облитерации в капиллярно-пористых структурах изделий гидросистем аэрокосмической техники // Вестник Самарского университета Аэрокосмическая техника, технологии. – 2009. – № 3 (19). – С. 143–146.
5. Design of aerospace vehicles' thermal protection based on heat-insulating materials with optimal structure / О. М. Alifanov, М. О. Salosina, S. A. Budnik, A. V. Nenarokomov // Aerospace. – 2023. – Vol. 10 (7). – P. 629. – DOI: 10.3390/aerospace10070629.
6. Применение пористых материалов в теплообменных аппаратах системы теплоснабжения / Н. В. Рыдалина, Б. Г. Аксенов, О. А. Степанов, Е. О. Антонова // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. – 2020. – Т. 22 (3). – С. 3–13. – DOI: 10.30724/1998-9903-2020-22-3-3-13.
7. Применение пористых металлов в конструкциях теплообменных аппаратов / Н. В. Рыдалина, О. А. Степанов, Е. О. Антонова // Вестник Евразийской науки. – 2023. – Т. 15 (1). – URL: <https://esj.today/PDF/24SAVN123.pdf>

8. Сон Э. Е. Демпферные системы защиты корпусов высоковольтного электрооборудования пористыми металлами // Известия РАН. Энергетика. – 2019. – № 6. – С. 78–109. – DOI: 10.1134/S0002331019060098.
9. Andrianov I. V., Kalamkarov A. L., Starushenko G. A. Analytical expressions for effective thermal conductivity of composite materials with inclusions of square cross-section // Composites. Part B: Engineering. – 2013. – Vol. 50. – P. 44–53. – DOI: 10.1016/j.compositesb.2013.01.023.
10. Experimental study of effective thermal conductivity of materials based on TPMS / D. M. Bragin, A. I. Popov, Yu. N. Ivannikov, A. V. Eremin, S. A. Zinina, N. N. Kechin // The 5th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA), Lipetsk, Russian Federation, November 8–10, 2023. – IEEE, 2023. – P. 983–985.
11. Prosviryakov E. Yu. Gravitational principle of minimum pressure for incompressible flows // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2021. – Iss. 2. – P. 22–29. – DOI: 10.17804/2410-9908.2021.2.022-029. – URL: [http://dream-journal.org/issues/content/article\\_315.html](http://dream-journal.org/issues/content/article_315.html)
12. Gorshkov, A. V., Prosviryakov, E. Yu. Analytical study of the Ekman angle for the Benard–Marangoni convective flow of viscous incompressible fluid // Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures. – 2021. – Iss. 4. – P. 34–48. – DOI: 10.17804/2410-9908.2021.4.34-49. – URL: [http://dream-journal.org/issues/2021-4/2021-4\\_340.html](http://dream-journal.org/issues/2021-4/2021-4_340.html)
13. Fischer W., Koch E. Spanning minimal surfaces // Philosophical Transactions of the Royal Society A. – 1996. – 354 (1715). – P. 2105–2142. – DOI: 10.1098/rsta.1996.0094.
14. Лыков А. В. Теория теплопроводности. – М. : Высшая школа, 1967. – 600 с.
15. Метод определения коэффициента эффективной теплопроводности пористого материала на основе минимальной поверхности типа Schoen’s I-WP(R) / Д. М. Брагин, А. В. Еремин, А. И. Попов, А. С. Шульга // Вестник ИГЭУ. – 2023. – № 2. – С. 61–68. – DOI: 10.17588/2072-2672.2023.2.061-068.
16. Определение эффективного коэффициента теплопроводности пористого материала с упорядоченной структурой, основанной на ТПМП I-WP / А. И. Попов, Д. М. Брагин, С. А. Зинина, А. В. Еремин, О. Д. Олатуйи // Международный журнал информационных технологий и энергоэффективности. – 2022. – Т. 7, № 3–1 (25). – С. 61–67.
17. Eremin A. V., Gubareva K. V., Popov A. I. Investigation of the temperature state of fuel elements with a given spatial distribution of heat sources // AIP Conf. Proc. – 2022. – 2456. – 020015. – DOI: 10.1063/5.0074727.
18. Kudinov I. V., Kotova E. V., Kudinov V. A. A method for obtaining analytical solutions to boundary value problems by defining additional boundary conditions and additional sought-for functions // Numerical Analysis and Applications. – 2019. – Vol. 12 (2). – P. 126–136. – DOI: 10.1134/S1995423919020034.
19. Kudinov V. A., Eremin A. V., Stefanyuk E. V. Analytical solutions of heat-conduction problems with time-varying heat-transfer coefficients // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2015. – Vol 88 (3). – P. 688–698. – DOI: 10.1007/s10891-015-1238-y.
20. Кудинов В. А., Карташов Э. М., Калашников В. В. Аналитические решения задач теплопереноса и термоупругости для многослойных конструкций : учеб. пособие для вузов. – М. : Высшая школа, 2005. – 430 с.

**Received:** 06.04.2024

**Revised:** 29.07.2024

**Accepted:** 16.08.2024



**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.4.083-101

## ANALYSIS OF METAL MICROSTRUCTURE BY NEURAL NETWORKS, EXEMPLIFIED BY SEGMENTATION OF CARBIDES IN COMPOSITE COATINGS

N. N. Soboleva

*Institute of Engineering Science, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
34 Komsomolskaya St., Ekaterinburg, 620049, Russia*

*M. N. Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
18 S. Kovalevskoy St., Ekaterinburg, 620108, Russia*

 <https://orcid.org/0000-0002-7598-2980>  [natashasoboleva@list.ru](mailto:natashasoboleva@list.ru)

Email: [natashasoboleva@list.ru](mailto:natashasoboleva@list.ru)

Address for correspondence: ul. Komsomolskaya, 34, Ekaterinburg, 620049, Russia

Tel.: +7 (343) 362-3033

The use of artificial neural networks in metal science to solve image analysis problems, in particular segmentation or classification of metal microstructures, includes 6 main stages: problem definition, dataset collection, model selection, model training, model evaluation, and integration with an existing workflow. The paper discusses these stages in detail, provides an example of their implementation for semantic segmentation of microstructures of composite coatings containing coarse primary carbides. The separation of carbides by a neural network makes it possible to automate the process of determining their volume fraction in the coating structure.

**Keywords:** neural networks, image analysis, semantic segmentation, composite coatings, volume fraction

### Acknowledgment

*The work was performed under the state assignment for the IES UB RAS, theme No. 124020600045-0, and the IMP UB RAS, theme No. 121102900049-1 “Additivity”. The equipment of the Plastometriya shared research facilities center of the IES UB RAS was used to obtain the microscopic images.*

### References

1. Saakov, D.V. Application of machine learning methods to optimize production processes in the metallurgical industry. *Innovatsii i Investitsii*, 2023, 5, 308–311. (In Russian).
2. Klyuev, A.V., Stolbov, V.Yu., Koptseva, N.V., and Efimova, Yu.Yu. Assessment of the strength characteristics of steels after thermomechanical treatment based on a neural network analysis of microstructures digital photographs. *Chernye Metally*, 2020, 6, 50–56. (In Russian).
3. Holm, E.A., Cohn, R., Gao, N., Kitahara, A.R., Matson, T.P., Lei B., and Yarasi S.R. Overview: computer vision and machine learning for microstructural characterization and analysis. *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, 2020, 51 (12), 5985–5999. DOI: 10.1007/s11661-020-06008-4.
4. Gupta, S., Banerjee, A., Sarkar, J., Kundu, M., Sinha, S.K., Bandyopadhyay, N.R., and Ganguly, S. Modelling the steel microstructure knowledge for in-silico recognition of phases using machine learning. *Materials Chemistry and Physics*, 2020, 252, 123286. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2020.123286.



5. Jang, J., Van, D., Jang, H., Baik, D.H., Yoo, S.D., Park, J., Mhin, S., Mazumder, J., and Lee, S.H. Residual neural network-based fully convolutional network for microstructure segmentation. *Science and Technology of Welding and Joining*, 2020, 25 (4), 282–289. DOI: 10.1080/13621718.2019.1687635.
6. Mulewicz, B., Korpala, G., Kusiak, J., and Prahla, U. Autonomous interpretation of the microstructure of steels and special alloys. *Materials Science Forum*, 2019, 949, 24–31. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.949.24.
7. DeCost, B.L., Francis, T., and Holm, E.A. Exploring the microstructure manifold: Image texture representations applied to ultrahigh carbon steel microstructures. *Acta Materialia*, 2017, 133, 30–40. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.05.014.
8. De Albuquerque, V.H.C., Cortez, P.C., De Alexandria, A.R., and Tavares, J.M.R.S. A new solution for automatic microstructures analysis from images based on a backpropagation artificial neural network. *Nondestructive Testing and Evaluation*, 2008, 23 (4), 273–283. DOI: 10.1080/10589750802258986.
9. Kondo, R., Yamakawa, S., Masuoka, Y., Tajima, S., and Asahi, R. Microstructure recognition using convolutional neural networks for prediction of ionic conductivity in ceramics. *Acta Materialia*, 2017, 141, 29–38. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.09.004.
10. Baskaran, A., Kautz, E.J., Chowdhary, A., Ma, W., Yener, B., and Lewis, D.J. Machine learning for microstructure characterization and materials design: a perspective. *JOM*, 2021, 73 (11), 3639–3657. DOI: 10.1007/s11837-021-04805-9.
11. Kovun, V.A. and Kashirina, I.L. Usage of U-Net and W-Net neural network architecture for steel sample metallographic analysis. *Vestnik VGU, Seriya Sistemnyi analiz i Informatsionnye Tekhnologii*, 2022, 1, 101–110. (In Russian). DOI: 10.17308/sait.2022.1/9205.
12. Wang, X.-d., Li, N., Su, H., and Meng, H.-m. Prior austenite grain boundary recognition in martensite microstructure based on deep learning. *Journal of Iron and Steel Research International*, 2023, 30, 1050–1056. DOI: 10.1007/s42243-023-00947-z.
13. Sharybin, S.I. *Avtomatizatsiya kontrolya kachestva funktsionalnykh materialov na osnove sredstv intellektualnoy podderzhki prinyatiya resheniy* [Automation of Quality Control of Functional Materials Based on Intellectual Decision Support Tools: Cand. Thesis]. Perm, 2015, 162 p. (In Russian).
14. Xie, L., Li, W., Fan, L., and Zhou, M. Automatic identification of the multiphase microstructures of steels based on ASPP-FCN. *Steel Research International*, 2023, 94, 2200204. DOI: 10.1002/srin.202200204.
15. Rose, D., Forth, J., Henein, H., Wolfe, T., and Qureshi, A.J. Automated semantic segmentation of NiCrBSi-WC optical microscopy images using convolutional neural networks. *Computational Materials Science*, 2022, 210, 111391. DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111391.
16. Sudyin, V.V. *Issledovanie osobennostey razrusheniya nizkolegirovannykh staley i ikh svarnykh soedineniy v intervale vyazko-khrupkogo perekhoda* [Investigation of the Features of Destruction of low-Alloy Steels and Their Welded Joints in the Interval of Ductile-Brittle Transition: Cand. Thesis]. Moscow, 2021, 189 p. (In Russian).
17. Krizhevsky, A., Sutskever, I., and Hinton, G.E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks. *Communications of the ACM*, 2017, 60 (6), 84–90. DOI: 10.1145/3065386.
18. Lukashik, D.V. Analysis of modern image segmentation methods. *Ekonomika i Kachestvo Sistem Svyazi*, 2022, 2 (24), 57–65. (In Russian).
19. Chen, Q., Zheng, C., Cui, Y., Lin, Y.-R., and Zinkle, S.J. A deep learning model for automatic analysis of cavities in irradiated materials. *Computational Materials Science*, 2023, 221, 112073. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112073.
20. Hurtado, J.V. and Valada, A. Semantic scene segmentation for robotics. Ch. 12. In: *Deep Learning for Robot Perception and Cognition*, Academic Press, 2022, 279–311. DOI: 10.1016/B978-0-32-385787-1.00017-8.

21. Xu, H. and Huang, H. Plasma remelting and injection method for fabricating metal matrix composite coatings reinforced with tungsten carbide. *Ceramics International*, 2022, 48, 2645–2659. DOI: 10.1016/j.ceramint.2021.10.048.
22. ASTM E 562–02. Standard test method for determining volume fraction by systematic manual point count.
23. <https://siams.com/>
24. Kazakov, A.A. and Kiselev, D. Industrial application of thixomet image analyzer for quantitative description of steel and alloy's microstructure. *Metallography, Microstructure, and Analysis*, 2016, 5, 294–301. DOI: 10.1007/s13632-016-0289-6.
25. Schneider, C.A., Rasband, W.S., and Eliceiri, K.W. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. *Nature Methods*, 2012, 9, 671–675. DOI: 10.1038/nmeth.2089.
26. <https://jmicrovision.github.io/>
27. Jacobs, R. Deep learning object detection in materials science: current state and future directions. *Computational Materials Science*, 2022, 211, 111527. DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111527.
28. Benjdira, B., Bazi, Y., Koubaa, A, and Ouni, K. Unsupervised domain adaptation using generative adversarial networks for semantic segmentation of aerial images. *Remote Sensing*, 2019, 11, 1369. DOI: 10.3390/rs11111369.
29. Wang, M., Wu, F., and Zhao, J. A comprehensive research and strategy of transfer learning for image segmentation. In: *Lecture Notes on Data Engineering and Communications Technologies book series*, Springer, Cham, 2021, 88, 1394–1406. DOI: 10.1007/978-3-030-70665-4\_152.
30. Aristov, G.V. and Klyuev, A.V. Recognition and classification of the microstructure of metals and alloys using deep neural networks. In: *Trudy XXVII Mezhdunarodnoj konferentsii po kompyuternoy grafike i mashinnomu zreniyu* [Proceedings of the 27th International Conference on Computer Graphics and Machine Vision GraphiCon, Perm, September 24–28, 2017]. PGNIU Publ., Perm, 2017, pp. 180–183. (In Russian).
31. Poletaeva, N.G. Classification of systems machine learning. *Vestnik Baltijskogo Federalnogo Universiteta im. I. Kanta. Seriya: Fiziko-Matematicheskie i Tekhnicheskie Nauki*, 2020, 1, 5–22. (In Russian).
32. <https://habr.com/ru/companies/smartengines/articles/264677>
33. Lozhkin, I.A., Dunaev, M.E., Zaitsev K.S., and Garmash, A.A. Augmentation of image sets for training neural networks in solving semantic segmentation problems. *International Journal of Open Information Technologies*, 2023, 11 (1), 109–117. (In Russian).
34. Soboleva, N. and Mushnikov, A. Improving the accuracy of semantic segmentation of carbides in the microstructure of composite coatings by the neural network. *Materials Today Communications*, 2024, 38, 108276. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2024.108276.
35. Sikorsky, O.S. Overview of convolutional neural networks for image classification problem. *Novye Informatsionnye Tekhnologii v Avtomatizirovannykh Sistemakh*, 2017, 20, 37–42. (In Russian).
36. Ronneberger, O., Fischer, P., and Brox, T. U-Net: convolutional networks for biomedical image segmentation. In: N. Navab, J. Hornegger, W. Wells, A. Frangi, eds. *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention – MICCAI 2015*, Lecture Notes in Computer Science series, vol. 9351, Springer, Cham, 2015. DOI: 10.1007/978-3-319-24574-4\_28
37. Badrinarayanan, V., Kendall, A., and Cipolla, R. SegNet: a deep convolutional encoder-decoder architecture for image segmentation. In: *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2017, 39, 2481–2495. DOI: 10.1109/tpami.2016.2644615.
38. Long, J., Shelhamer, E., and Darrell, T. Fully convolutional networks for semantic segmentation. In: *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, MA, Boston, USA, 2015, IEEE, 2015, 3431–3440. DOI: 10.1109/cvpr.2015.7298965.

39. Zhao, H., Shi, J., Qi, X., Wang, X., Jia, J. Pyramid scene parsing network. In: *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, HI, Honolulu, USA, 2017, IEEE, 2017, 6230–6239. DOI: 10.1109/cvpr.2017.660.
40. Lin, G., Milan, A., Shen, C., and Reid, I. RefineNet: multi-path refinement networks for high-resolution semantic segmentation. In: *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, HI, Honolulu, USA, 2017, IEEE, 2017, 5168–5177. DOI: 10.1109/cvpr.2017.549.
41. Chen, L.C., Papandreou, G., Kokkinos, I., Murphy, K., and Yuille, A.L. DeepLab: semantic image segmentation with deep convolutional nets, atrous convolution, and fully connected CRFs. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2018, 40 (4), 834–848. DOI: 10.1109/TPAMI.2017.2699184.
42. Chen, L.C., Papandreou, G., Schroff, F., and Adam, H. Rethinking atrous convolution for semantic image segmentation, 2017, 1706.05587. DOI: 10.48550/arXiv.1706.05587.
43. Soboleva, N.N. and Mushnikov, A.N. Determination of the volume fraction of primary carbides in the micro-structure of composite coatings using semantic segmentation. *Frontier Materials & Technologies*, 2023, 3, 95–102. DOI: 10.18323/2782-4039-2023-3-65-9.
44. Yamashita, R., Nishio, M., Do, R.K.G., and Togashi, K. Convolutional neural networks: an overview and application in radiology. *Insights into Imaging*, 2018, 9, 611–629. DOI: 10.1007/s13244-018-0639-9.
45. Vik, K.V., Druki, A.A., Grigoriev, D.S., and Spitsyn, V.G. Application of deep learning neural networks for solving the problem of forest fire segmentation on satellite images. *Vestnik Tomskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Upravlenie, Vychislitel'naja Tekhnika i Informatika*, 2021, 55, 18–25. (In Russian). DOI: 10.17223/19988605/55/3.
46. Keskar, N., Mudigere, D., Nocedal, J., Smelyanskiy, M., and Tang, P. On large-batch training for deep learning: generalization gap and sharp minima, 2016, arXiv:1609.04836v2. DOI: 10.48550/arXiv.1609.04836.
47. Xu H., He, H., Zhang, Y., Ma, L., and Li, J. A comparative study of loss functions for road segmentation in remotely sensed road datasets. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 2023, 116, 103159. DOI: 10.1016/j.jag.2022.103159.
48. Emelianov, V., Zhilenkov, A., Chernyi, S., Zinchenko, A., and Zinchenko, E. Application of artificial intelligence technologies in metallographic analysis for quality assessment in the shipbuilding industry. *Heliyon*, 2022, 8 (8), e10002. DOI: 10.1016/j.heliyon.2022.e10002.
49. Raketov, K.V., Israilev, N.Yu., Kazachkov, A.O., Zablotskaya, E.Yu., Rod, I.A., Ryabkov, M.S., Isachenko, A.V., and Shamiryan, D.G. Automated defect detection system in MEMS production. *Nanoindustriya*, 2018, 11, 7–8 (86), 542–548. (In Russian). DOI: 10.22184/1993-8578.2018.11.7-8.542.548.
50. <https://axalit.ru>
51. Matveev, A.V., Nartova, A.V., Sankova, N.N., and Okunev, A.G. DLgram cloud service for deep-learning analysis of microscopy images *Microscopy Research and Technique*, 2024, vol. 87 (5), pp. 991–998. DOI: 10.1002/jemt.24480.
52. [https://t.me/nanoparticles\\_nsk](https://t.me/nanoparticles_nsk)
53. Soboleva, N.N. RF Software Registration Certificate No. 2023660789, 2023.

Подана в журнал: 06.04.2024

УДК 620.186:004.855.5

DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.083-101

## АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУРЫ МЕТАЛЛА НЕЙРОННЫМИ СЕТЯМИ НА ПРИМЕРЕ СЕГМЕНТАЦИИ КАРБИДОВ В КОМПОЗИЦИОННЫХ ПОКРЫТИЯХ



Н. Н. Соболева

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения  
им. Э. С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук,*

*ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, 620049, Россия*

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки*

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук,  
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620137, Россия*

 <https://orcid.org/0000-0002-7598-2980>  [natashasoboleva@list.ru](mailto:natashasoboleva@list.ru)

Электронная почта: [natashasoboleva@list.ru](mailto:natashasoboleva@list.ru)

Адрес для переписки: ул. Комсомольская, 34, Екатеринбург, 620049, Россия

Тел.: +7 (343) 362-30-33

Использование искусственных нейронных сетей в металловедении для решения задач анализа изображений, в частности сегментации или классификации микроструктур металлов, включает в себя 6 основных этапов: определение проблемы, составление набора данных, выбор модели, обучение модели, оценка модели, интеграция с существующим рабочим процессом. В статье подробно рассмотрены эти этапы, приводится пример их реализации для семантической сегментации микроструктур композиционных покрытий, содержащих крупные первичные карбиды. Выделение карбидов нейронной сетью позволяет автоматизировать процесс определения их объемной доли в структуре покрытий.

**Ключевые слова:** нейронные сети, анализ изображений, семантическая сегментация, композиционные покрытия, объемная доля

### 1. Введение

В настоящее время методы машинного обучения широко используются в различных отраслях промышленности, так как позволяют автоматизировать производственные процессы, улучшить качество продукции и снизить затраты на производство [1]. Современные методы машинного обучения применяют и в металловедении [2–4]. Так, в последнее время было проведено много исследований, использующих алгоритмы машинного обучения для классификации микроструктур [5–7], их количественного анализа [8], открытия новых материалов, обладающих полезными свойствами [9], и т. д.

При применении искусственных нейронных сетей в металловедении каноничной является цепочка из 6 этапов: определение проблемы, составление набора данных, выбор модели, обучение модели, оценка модели, интеграция с существующим рабочим процессом [10].

Однако исследовательские статьи в основном не нацелены на подробное описание методологии решения задачи, при этом в них используется специальная терминология, сложная для специалистов в области металловедения, не использующих нейронные сети в работе. Поэтому целью статьи является адаптация методологических подходов, используемых специалистами в области машинного обучения, к решению задачи металловедения на примере сегментации карбидов в композиционных покрытиях.



## 2. Этап 1: определение цели

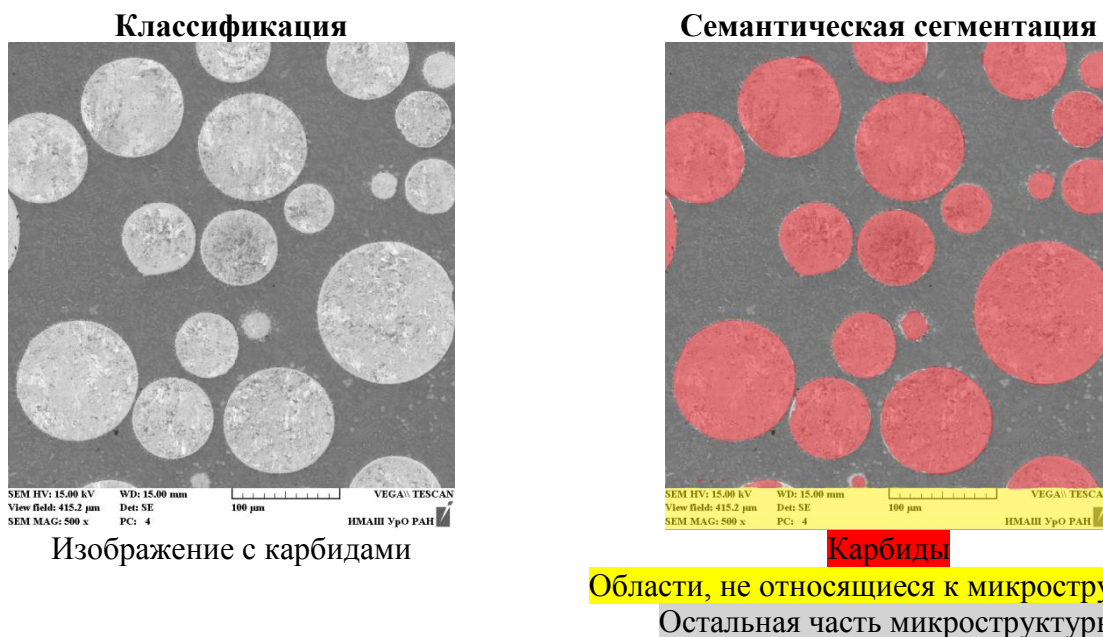
Задачи металловедения, решаемые с использованием нейронных сетей, условно можно разделить на два класса по типу обрабатываемых данных. В первом случае происходит анализ изображений. Во втором случае реализуется работа нейросети с иными данными, устанавливаются взаимосвязи составов, структур и свойств, что в итоге позволяет прогнозировать эти характеристики, тем самым решая задачи оптимизации.

Настоящая работа посвящена анализу изображений. Он может включать в себя как выделение границ объектов, что, в частности, позволит определить границы зерен [11, 12], так и выделение самих объектов, что позволит распознавать структурные составляющие [13, 14], выделять вторую фазу [15], различать хрупкий/вязкий излом [16] и т. д. В результате решаются задачи классификации или сегментации.

Классификация изображений – это задача категоризации целого объекта. Например, в наборе изображений ImageNet [17] каждому изображению присваивается класс, независимо от того, является ли соответствующая информация только подмножеством изображения. При анализе изображений микроструктур в результате классификации возможно, например, отделить фотографии микроструктур без карбидов от фотографий микроструктур с карбидами (табл. 1, левый столбец).

Таблица 1

Пример классификации и семантической сегментации изображения микроструктуры композиционного покрытия



Сегментация относится к задаче разделения изображения на области (сегменты), принадлежащие одному и тому же объекту, и последующей классификации частей изображения. Таким образом, в результате сегментации распознается не только наличие объектов (карбидов) на изображении, но и занимаемое ими место на картинке. Существуют различные виды сегментации, например паноптическая, экземплярная [18], но в металловедении зачастую решается задача семантической сегментации, например: отделить карбиды на изображении структуры композиционного покрытия от остальной части микроструктуры, при этом нет необходимости отличать один карбид от другого (табл. 1, правый столбец). Семантическая сегментация классифицирует каждый пиксель и группирует вместе пиксели, принадлежащие одному и тому же объекту на изображении [19]. Модели семантической сегментации выдают

семантическое предсказание, которое содержит категории объекта, местоположения и формы всех элементов изображения, включая фон [20].

Решение задачи семантической сегментации карбидов в структуре композиционных покрытий позволит оценить объемную долю первичных карбидов в микроструктуре материала. Определение объемной доли первичных карбидов поможет выбрать такой режим наплавки, который обеспечивает сохранение наибольшего их количества в покрытии, так как это влияет на работоспособность покрытий в условиях абразивного изнашивания [21].

### 3. Возможные варианты решения задачи

До начала использования нейронной сети целесообразно проанализировать иные способы решения задачи.

Так, стандартизованным методом определения объемной доли второй фазы в микроструктуре является ручной точечный метод по ASTM E 562-02 [22]. Частично автоматизированным является использование программ, реализующих классические методы машинного зрения, например Siams [23], Thixomet [24], ImageJ [25], JMicroVision [26] и т. п. Однако использование этих методов может приводить к ошибкам из-за различной интерпретации результатов разными людьми и не масштабируется для больших размеров набора данных [27].

Новейшим способом определения объемной доли карбидов в микроструктуре покрытий является проведение семантической сегментации с использованием нейронных сетей, что позволит полностью автоматизировать процесс [15]. До того как программирование глубоких нейронных сетей получило широкое распространение, исследование алгоритмов семантической сегментации надолго застопорилось из-за низкой точности традиционных алгоритмов анализа изображений, основанных на ручном извлечении признаков [28]. Однако с появлением высокоописательных средств извлечения признаков, таких как сверточные нейронные сети, и усовершенствованием графических процессоров, которые обеспечивают огромную вычислительную мощность, необходимую для использования сверточных нейронных сетей, исследования в области семантической сегментации совершили крупный прорыв [29].

### 4. Этап 2: составление набора данных

Этап 2 – составление набора данных – является одним из самых трудоемких в случае отсутствия готового набора данных.

Некоторые исследователи загружают использованные в их работе наборы данных в открытые репозитории, оставляя ссылку на них в соответствующих публикациях. Например, в работе [15] содержится ссылка (<https://data.mendeley.com/datasets/2wmbc95xy9/1>) на набор изображений с оптического микроскопа для сегментации карбидов вольфрама в структуре композиционных материалов NiCrBSi–WC.

В работе [30] обучающее множество было сформировано из микрофотографий веб-ресурса DoITPoMS (Dissemination of IT for the promotion of Materials Science) Кембриджского университета, содержащего около 900 изображений микроструктур. Доступ к ним осуществляется по адресу: <https://www.doitpoms.ac.uk/>. Однако использование данного набора для решения практических задач затруднительно ввиду большого разнообразия представленных структур и малого количества изображений для каждого отдельного состояния, что препятствует выделению общих признаков при работе нейронной сети.

Таким образом, для решения конкретной практической задачи необходимо составлять собственный набор данных.

Существует три метода машинного обучения: с учителем, без учителя, с подкреплением [31]. В металловедении при сегментации микроструктур обучение нейронной сети обычно происходит с учителем, то есть на вход нейронной сети вместе с обучающим множеством (изображениями) подается правильный ответ распознавания. При обучении сеть кор-

ректирует весовые коэффициенты, исходя из разницы значений между фактическим ответом и ответом, данным «учителем» [30]. В связи с этим необходимы предварительно размеченные изображения. При этом при решении задач классификации (определения морфологического класса) достаточно одной метки на изображение, а при решении задач семантической сегментации (фазовой сегментации для количественного анализа) разметкой является одна метка на пиксель [10].

В задаче сегментации карбидов в композиционных покрытиях карбиды могут быть округлой или угловатой формы, выглядеть темнее или светлее матрицы на микрофотографиях; в структуре покрытий могут присутствовать поры; на изображениях могут быть участки, не относящиеся к микроструктуре (область с параметрами съемки); изображения могут быть разных размеров. Чтобы одна и та же нейронная сеть могла работать со всеми этими случаями, для ее обучения необходимо создать такой набор данных, который содержит в себе все те особенности, с которыми мы можем столкнуться при анализе.

На тех изображениях, где карбиды темнее матрицы и присутствуют поры, автоматизированные программы, решающие задачу сегментации по градиенту цветов, могут ошибочно принимать поры за карбиды. Области с параметрами съемки обычно предварительно отрезаются от изображения, однако в задуманной реализации работы нейронной сети эта область должна распознаваться сетью и вычитаться из общей площади изображения при последующем расчете объемной доли карбидов в структуре, что обеспечит максимальную автоматизацию процесса анализа. Таким образом, для автоматизации и снижения доли ошибок целесообразным является решение задачи многоклассовой сегментации, где сеть будет выделять также поры и области, не относящиеся к микроструктуре.

Были подготовлены изображения с оптического и электронного микроскопов, содержащие все эти особенности (рис. 1). Затем выполнялась ручная разметка изображений на 4 класса. Были созданы так называемые маски изображений (Ground Truth Images), на которых красный цвет соответствует нахождению в этой области карбидов, зеленый – пор, желтый соответствует части изображения, не относящейся к микроструктуре, белый – остальной части микроструктуры (рис. 2).

Состав обучающей базы, то есть количество изображений, на которых будет обучаться нейронная сеть, может оказывать на качество получающейся системы распознавания большее влияние, чем все остальные факторы [32]. Поэтому необходимо расширение набора данных. Это можно сделать путем увеличения количества исходных изображений (но для этого необходимо получить микрофотографии и подготовить «маски») или используя прием, называемый аугментацией.

Аугментация позволяет расширить набор данных путем геометрических преобразований (поворот на определенный или произвольный угол, отражение по оси или зеркальное, сдвиг части изображения относительно другой, уменьшение/увеличение изображения, вырезание части изображения) или путем преобразований на уровне пикселей (зашумление, изменение яркости, насыщенности, контрастности, применение фильтров и другие методы) [33]. Также можно применять различные комбинации, например, вырезать часть изображения, отразить его и изменить его яркость.

Аугментация позволяет многократно расширить набор данных. При этом каждое такое аугментированное изображение является для сети новым, и результаты ее обучения улучшаются. Важно отметить, что при применении аугментации ее необходимо проводить и для «масок» изображений, так как правильный ответ при обучении в этом случае тоже изменится относительно исходного изображения.

Пример применения аугментации для структуры композиционного покрытия приведен на рис. 3 и 4.

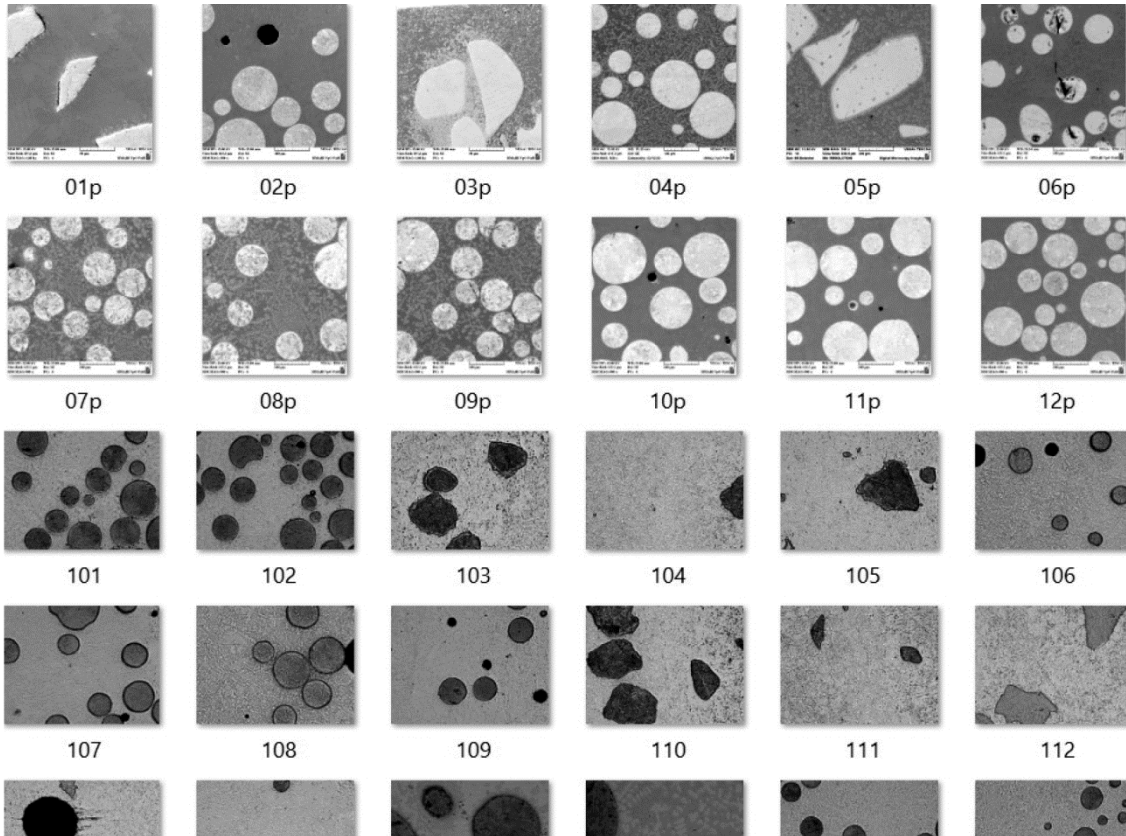


Рис. 1. Часть набора данных из изображений микроструктур композиционных покрытий

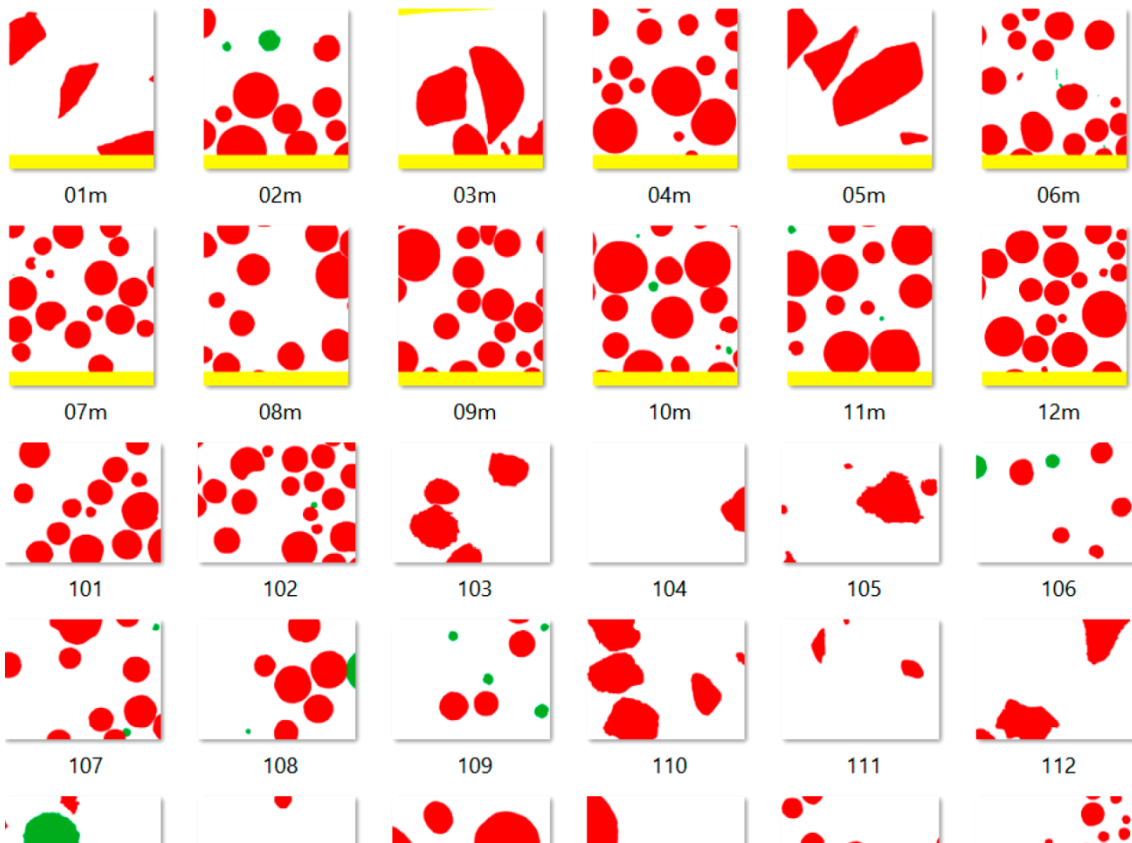


Рис. 2. Соответствующий рисунку 1 размеченный набор изображений



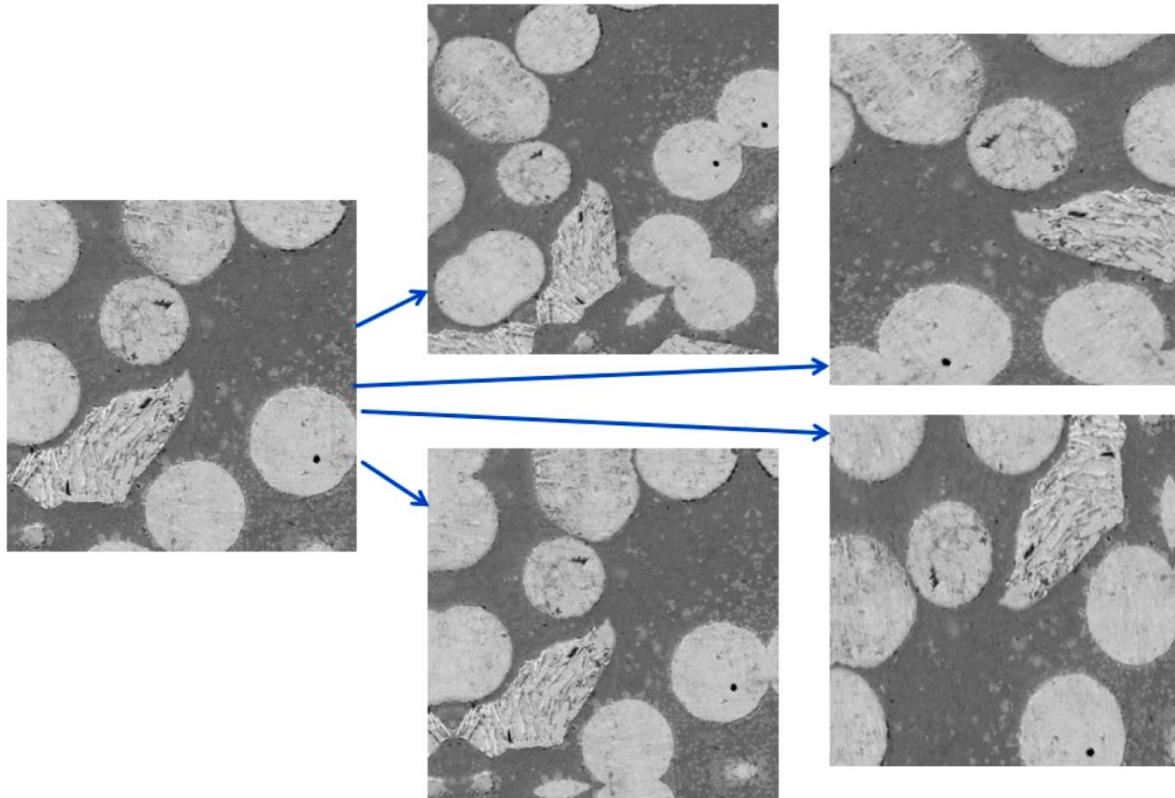


Рис. 3. Пример аугментации путем геометрических преобразований изображения структуры композиционного покрытия

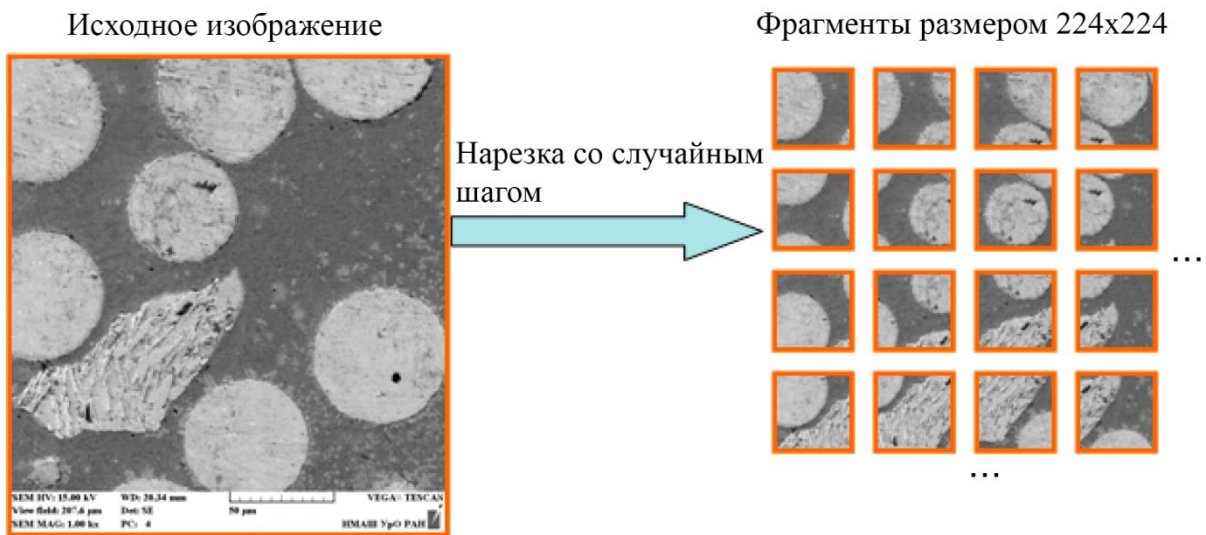


Рис. 4. Пример нарезки изображения структуры композиционного покрытия на фрагменты фиксированного размера [34]

### 5. Этап 3: выбор модели

Для решения задач классификации и сегментации изображений в основном используют сверточные нейронные сети, так как они имеют специальную архитектуру, нацеленную на распознавание изображений [30]. При обучении на изображениях одного класса сверточные нейронные сети самостоятельно формируют карты признаков, с помощью которых изображения классифицируются [30].

Существует большое количество уже разработанных сетей для решения задач анализа изображений. Так, для классификации используются нейронные сети AlexNet, ConvNeXt, DenseNet, EfficientNet, Inception (GoogLeNet), MaxVit, MNASNet, MobileNet, RegNet, ResNet, SqueezeNet, VGG и другие [35], для сегментации – U-Net (или U-net) [36], SegNet [37], FCN [38], PSPNet [39], RefineNet [40], DeepLab [41] и другие. При необходимости можно создать собственную сеть.

Для построения нейронной сети, сегментирующей карбиды в структуре композиционных покрытий, использовали фреймворк PyTorch. За основу была взята предобученная модель deeplabv3\_resnet101 [42] из библиотеки torchvision. Количество выходных слоев в последней свертке сети было заменено на 4, по количеству идентифицируемых классов [43].

#### 6. Этап 4: обучение модели

При обучении сети существуют различные параметры и гиперпараметры, в табл. 2 приведен их список для сверточной нейронной сети. Параметры – это переменные, которые автоматически оптимизируются в процессе обучения, а гиперпараметры – это переменные, которые необходимо задать заранее [44].

Таблица 2

Список параметров и гиперпараметров в сверточной нейронной сети [44]

	Параметры	Гиперпараметры
Сверточный слой	Ядра	Размерность ядра фильтра, форма ядра фильтра, шаг перемещения, отступ, функция активации
Подвыборочный слой	Нет	Метод подвыборки, размер фильтра, шаг перемещения, отступ
Полносвязный слой	Веса	Количество весов, функция активации
Другие		Архитектура модели, оптимизатор, скорость обучения, функция потерь, размер мини-выборки, эпохи, регуляризация, инициализация весов, разделение набора данных

Основной операцией, осуществляемой при работе сверточной нейронной сети, является свертка. Свертка используется для извлечения признаков, при этом небольшой массив чисел, называемый ядром, применяется к входным данным, представляющим собой массив чисел, называемый тензором. Поэлементное произведение между каждым элементом ядра и входным тензором вычисляется в каждом местоположении тензора и суммируется для получения выходного значения в соответствующем положении выходного тензора, называемого картой объектов. Эта процедура повторяется с применением нескольких ядер для формирования произвольного количества карт объектов, которые представляют разные характеристики входных тензоров. Таким образом, разные ядра можно рассматривать как разные средства извлечения признаков. Двумя ключевыми гиперпараметрами, определяющими операцию свертки, являются размер и количество ядер (табл. 2) [44].

Как правило, архитектура и различные параметры нейронной сети выбираются экспериментальным путем. Это обусловлено тем, что сверточные нейронные сети содержат большое количество параметров, и на сегодняшний день не существует строго формализованных правил подбора этих параметров и структуры сети в целом [45].

Если используется известная сеть, то большинство гиперпараметров уже определены архитектурой сети. Фактически мы выбираем скорость обучения (learning rate), функцию по-

ть (loss function), размер мини-выборки (mini-batch size), эпохи (epochs), разделение набора данных (dataset splitting).

Перед началом обучения модели проводится разделение набора изображений на три класса. Первый – обучающий (тренировочный) набор, на этих изображениях сеть обучается, происходит настройка параметров модели (весов между нейронами). Второй – проверочный набор (валидационный), изображения из него сеть не видит, на них не учится, но они используются для проверки результатов тренировки модели в процессе обучения и настройки гиперпараметров. Третий набор – тестовый, для непредвзятой оценки работы модели: это те изображения, которые сеть не видела и по ним не подстраивала никакие параметры. Иногда не выделяют изображения в тестовый набор, оценивая работу сети по метрикам, полученным на валидационном наборе, но это зачастую некорректно, так как результат в таком случае будет лучше, чем для тестового набора.

Обычно набор данных разделяют так, чтобы отнести 80 % изображений к обучающему набору, 20 % – к проверочному. Для тестового набора отдельно готовят несколько изображений, при этом желательно, чтобы эти изображения включали все возможные признаки, чтобы можно было удостовериться, что сеть научилась выделять их все.

Тестовый набор изображений микроструктуры композиционных покрытий, использованный в работе [43], показан на рис. 5. В него были включены изображения с различными характеристиками: разные размеры изображений, форматы TIFF или JPG, карбиды сферической или угловатой формы, карбиды светлее или темнее матрицы, наличие или отсутствие пор, наличие или отсутствие областей, не являющихся микроструктурой (области с параметрами съемки и масштабной линейкой).

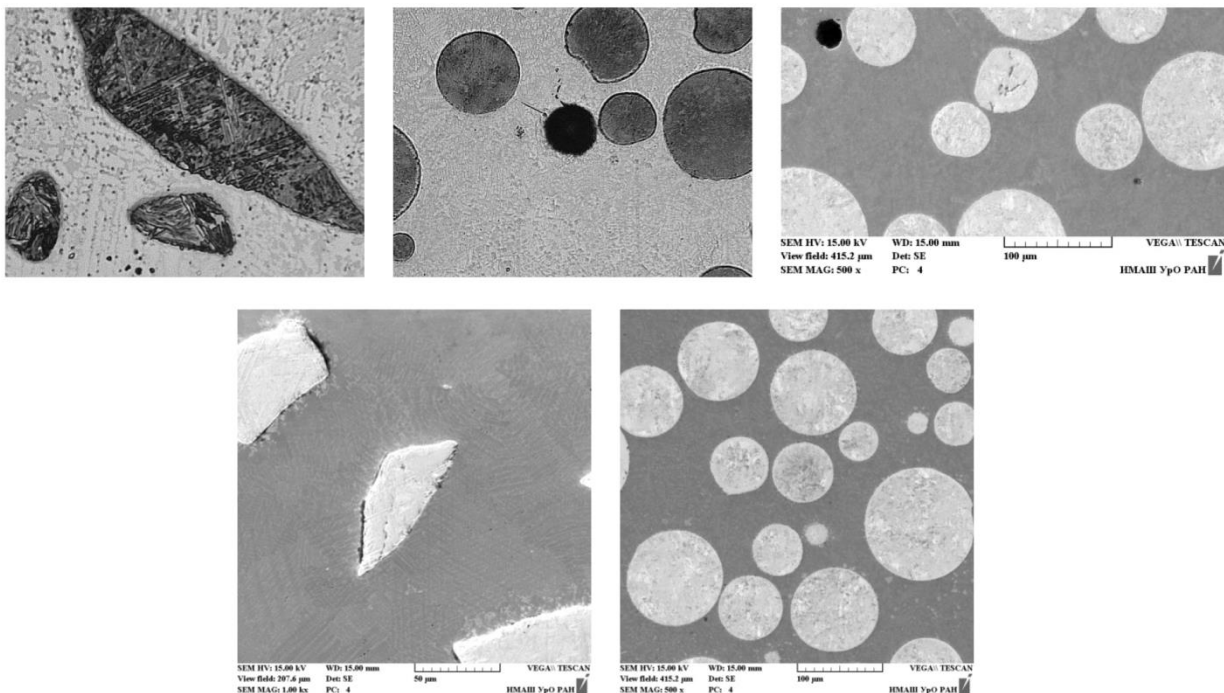


Рис. 5. Пример тестового набора изображений микроструктуры композиционных покрытий [43]

В случае если обучение проводится на большом количестве изображений, они разбиваются на пакеты, или батчи (batch), так как оперативной или видеопамати может быть недостаточно для вмещения всего набора данных. Традиционно считается, что качество обучения лучше при увеличении размера мини-выборки (mini-batch size), поэтому выбирают максимальный размер мини-выборки (количество изображений, на которых сеть будет обучаться одновременно), доступный на используемом устройстве. Однако в работе [46] показано, что



при использовании чрезмерно большого размера мини-выборки существует тенденция к ухудшению обобщающей способности сети, то есть способности показывать правильные результаты на новых изображениях, которые не были использованы для обучения сети.

После того как все изображения будут проанализированы нейросетью один раз (то есть мы достигнем конца набора данных), пройдет одна эпоха (epoch) обучения. Затем выполняется случайная перетасовка примеров, чтобы каждый мини-пакет в следующую эпоху отличался от предыдущего. При использовании большого количества эпох возможно явление «переобучения» нейронной сети, когда сеть просто запоминает правильный вывод для каждого входного сигнала. В таком случае точность распознавания на обучающем наборе растет, но модель не приобретает способности к обобщению, и работа сети на валидационном и тестовом наборах ухудшается.

При сегментации карбидов в структуре композиционных покрытий проводилось обучение головной части сети (model.classifier), а остальные веса модели были заморожены. В последней свертке количество выходных слоев соответствовало количеству идентифицируемых классов (по умолчанию их 21, для решения поставленной задачи это значение было изменено на 4).

При постобработке выхода сети считали, что пиксель может относиться только к одному классу. Поэтому для класса с максимальной вероятностью вероятность отнесения пикселя к этому классу принимали за 1, а для остальных классов устанавливали вероятность 0.

При обучении нейронной сети использовали оптимизатор Adam. Обучение ограничили 1000 эпохами, скорость обучения варьировали от  $10^{-4}$  до  $10^{-1}$ , размер мини-выборки – от 2 до 384 [34].

## 7. Этап 5: оценка модели

Следующий этап – оценка модели, проверка качества обучения. Выбор подходящего показателя оценки важен для получения объективной оценки обученной модели [10]. Существует большое количество различных метрик, используемых для оценки работы нейронной сети. Выбор показателя зависит от таких факторов, как специфика предметной области, размер набора данных, распределение данных между различными классами-кандидатами и т. д. [10]. При этом некорректно сравнивать модели, оцененные с использованием разных показателей.

Рассмотрим некоторые наиболее распространенные показатели для оценки эффективности классификации или сегментации микроструктуры металла.

Accuracy (достоверность, доля правильных ответов):  $(TP + TN) / (TP + TN + FP + FN)$ .

Precision (точность):  $TP / (TP + FP)$ .

Recall (полнота):  $TP / (TP + FN)$ .

IoU – Intersection-Over-Union (Jaccard Index) (объединение над пересечением, коэффициент Жаккарда):  $TP / (TP + FP + FN)$ .

Dice (F1 Score) (Dice-Sørensen coefficient) (коэффициент Дайса):  $2TP / (2TP + FP + FN)$ .

Показатели основаны на следующих понятиях:

TP – True Positives – истинно положительные значения – данные с меткой класса Y, которые были правильно классифицированы как класс Y;

TN – True Negatives – истинно отрицательные значения – данные, не относящиеся к классу Y, которые не были классифицированы как класс Y;

FP – False Positives – ложноположительные результаты – данные, не относящиеся к классу Y, которые были неправильно классифицированы как класс Y;

FN – False Negatives – ложноотрицательные результаты – данные, относящиеся к классу Y, которые не были классифицированы как класс Y.

Метрики могут принимать значения от 0 до 1; соответственно, чем ближе к 1, тем лучше качество обучения. Иногда их переводят в проценты.



Визуальное представление метрик Accuracy, Precision, Recall, IoU, Dice при различном соотношении TP, TN, FP и FN представлено на рис. 6.

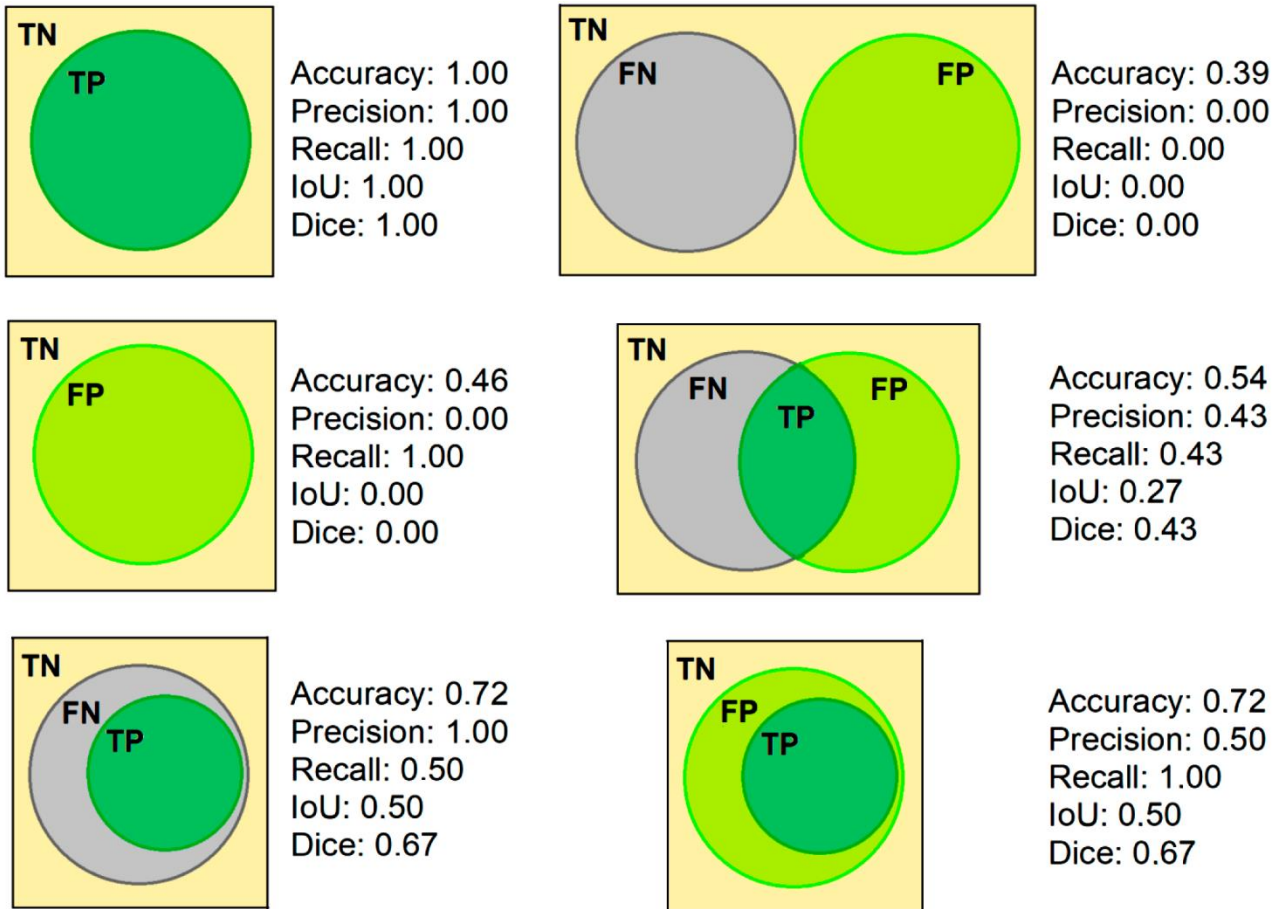


Рис. 6. Пример расчета метрик Accuracy, Precision, Recall, IoU, Dice при решении задач с различными показателями TP (True Positives), TN (True Negatives), FP (False Positives) и FN (False Negatives)

Приведенные выше метрики хорошо работают при бинарной классификации. Если классов несколько (например, многоклассовая сегментация), то применяют MeanIoU, MeanDice и т. п., которые оценивают метрики для всех классов и считают среднее по ним значение.

Ни одна функция потерь не работает идеально с точки зрения всех критериев оценки в каждом наборе данных. В результате крайне важно выбрать функцию потерь, которая наилучшим образом соответствует целям исследования, таким как получение оптимальных результатов или сосредоточение внимания либо на точности, либо на полноте [47].

Проверка качества семантической сегментации карбидов в микроструктуре композиционных покрытий проводилась с использованием метрики MeanIoU и, соответственно, функции потерь  $1 - \text{MeanIoU}$ .

## 8. Этап 6: интеграция с рабочим процессом

Заключительный этап – интеграция с рабочим процессом. На этом этапе необходимо вернуться к исходной цели и создать возможности использования обученной нейронной сети для ее достижения.

В ряде случаев это осуществляют созданием программного обеспечения, использующего нейронные сети, обученные для работы с изображениями структур. Так, авторы [48] разработали программное обеспечение, определяющее марку стали, размер и количество

зерен, соотношение феррита и перлита и т. д. В работе [49] сообщается о создании автоматизированной системы детектирования дефектов литографии. Создатели использованного в [49] программного обеспечения сообщают [50] о возможности анализа включений графита в чугуне и решения прочих задач металловедения. Авторы [51] разработали облачный сервис обработки изображений микроструктур DLgram, использующий мессенджер Telegram в качестве интерфейса [52], позволяющий пользователям дообучить нейросеть под конкретную задачу.

В задаче сегментации карбидов в структуре композиционных покрытий выделение карбидов нейронной сетью является средством для достижения цели – расчета их объемной доли. Это можно сделать через отношение количества пикселей изображения, соответствующих карбидам (красные участки на рис. 7), к общему числу пикселей за вычетом зон, не входящих в микроструктуру (желтые участки на рис. 7).

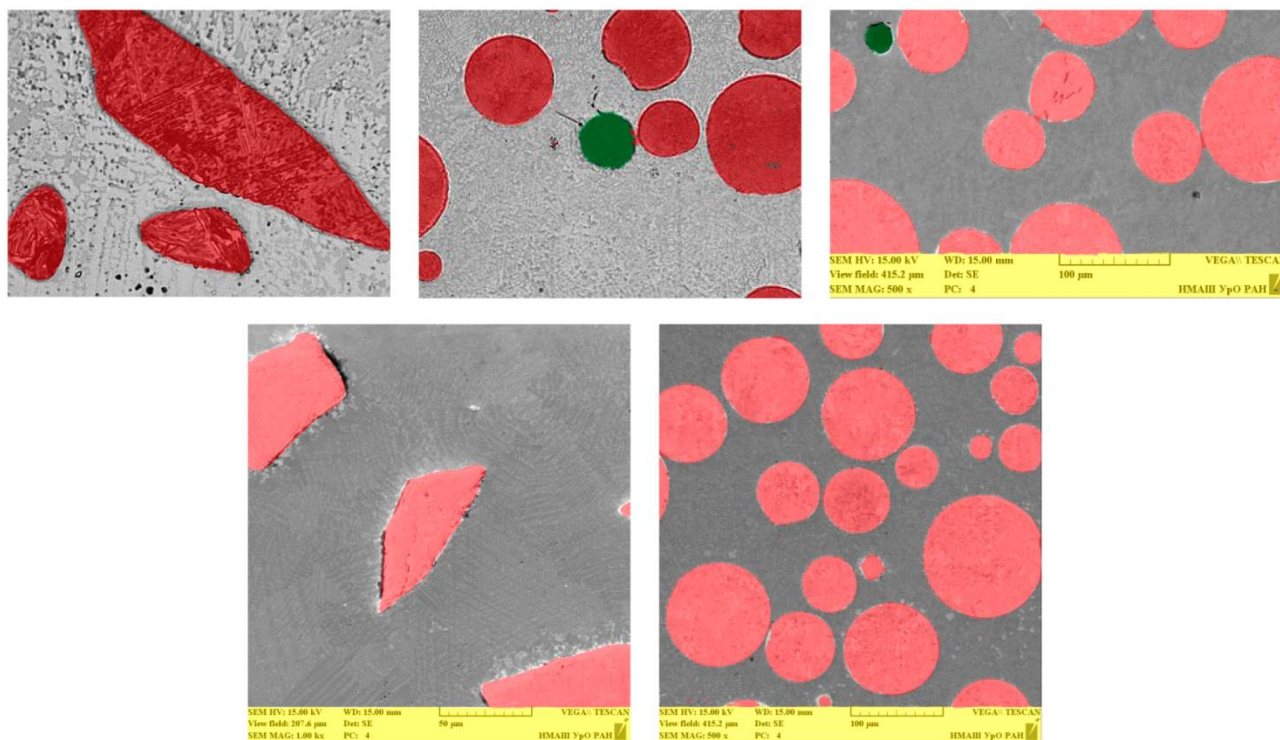


Рис. 7. Результат сегментации изображений микроструктуры композиционных покрытий из тестового набора, представленного на рис. 5

Была зарегистрирована программа для ЭВМ «Определение объемной доли карбидов в структуре композиционных покрытий с помощью сверточной нейронной сети» [53].

## 9. Заключение

На примере сегментации микроструктур композиционных покрытий рассмотрены этапы использования нейронных сетей для анализа изображений структуры металлов: определение проблемы, составление набора данных, выбор модели, обучение модели, оценка модели, интеграция с существующим рабочим процессом. Семантическая сегментация крупных первичных карбидов нейронной сетью позволяет автоматизировать процесс определения их объемной доли в структуре покрытий.

## Благодарность

*Работа выполнена в рамках государственного задания ИМАШ УрО РАН по теме № 124020600045-0 и ИФМ УрО РАН по теме «Аддитивность» № 121102900049-1. Микроскопические изображения получены с использованием оборудования ЦКП «Пластометрия» ИМАШ УрО РАН.*

## Литература

1. Сааков Д. В. Применение методов машинного обучения для оптимизации производственных процессов в металлургической промышленности // Инновации и инвестиции. – 2023. – №. 5. – С. 308–311.
2. Оценка прочностных характеристик сталей после термомеханической обработки на основе нейросетевого анализа цифровых фотографий микроструктур / А. В. Клюев, В. Ю. Столбов, Н. В. Копцева, Ю. Ю. Ефимова // Черные металлы. – 2020. – №. 6. – С. 50–56.
3. Overview: computer vision and machine learning for microstructural characterization and analysis / E. A. Holm, R. Cohn, N. Gao, A. R. Kitahara, T. P. Matson, B. Lei, S. R. Yarasi // Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science. – 2020. – Vol. 51 (12). – P. 5985–5999. – DOI: 10.1007/s11661-020-06008-4.
4. Modelling the steel microstructure knowledge for in-silico recognition of phases using machine learning / S. Gupta, A. Banerjee, J. Sarkar, M. Kundu, S. K. Sinha, N. R. Bandyopadhyay, S. Ganguly // Materials Chemistry and Physics. – 2020. – Vol. 252. – P. 123286. – DOI: 10.1016/j.matchemphys.2020.123286.
5. Residual neural network-based fully convolutional network for microstructure segmentation / J. Jang, D. Van, H. Jang, D. H. Baik, S. D. Yoo, J. Park, S. Mhin, J. Mazumder, S. H. Lee // Science and Technology of Welding and Joining. – 2020. – Vol. 25 (4). – P. 282–289. – DOI: 10.1080/13621718.2019.1687635.
6. Autonomous interpretation of the microstructure of steels and special alloys / B. Mulewicz, G. Korpala, J. Kusiak, U. Pahl // Materials Science Forum. – 2019. – Vol. 949. – P. 24–31. – DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.949.24.
7. DeCost B. L., Francis T., Holm E. A. Exploring the microstructure manifold: Image texture representations applied to ultrahigh carbon steel microstructures // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 133. – P. 30–40. – DOI: 10.1016/j.actamat.2017.05.014.
8. A new solution for automatic microstructures analysis from images based on a backpropagation artificial neural network / V. H. C. De Albuquerque, P. C. Cortez, A. R. De Alexandria, J. M. R. S. Tavares // Nondestructive Testing and Evaluation. – 2008. – Vol. 23 (4). – P. 273–283. – DOI: 10.1080/10589750802258986.
9. Microstructure recognition using convolutional neural networks for prediction of ionic conductivity in ceramics / R. Kondo, S. Yamakawa, Y. Masuoka, S. Tajima, R. Asahi // Acta Materialia. – 2017. – Vol. 141. – P. 29–38. – DOI: 10.1016/j.actamat.2017.09.004.
10. Machine learning for microstructure characterization and materials design: a perspective / A. Baskaran, E. J. Kautz, A. Chowdhary, W. Ma, B. Yener, D. J. Lewis // JOM. – 2021. – Vol. 73 (11). – P. 3639–3657. – DOI: 10.1007/s11837-021-04805-9.
11. Ковун В. А., Каширина И. Л. Использование нейронных сетей U-Net и W-Net в металлографическом анализе образцов стали // Вестник ВГУ. Серия «Системный анализ и информационные технологии». – 2022. – № 1. – С. 101–110. – DOI: 10.17308/sait.2022.1/9205.
12. Prior austenite grain boundary recognition in martensite microstructure based on deep learning / X.-d. Wang, N. Li, H. Su, H.-m. Meng // Journal of Iron and Steel Research International. – 2023. – Vol. 30. – P. 1050–1056. – DOI: 10.1007/s42243-023-00947-z.



13. Шарыбин С. И. Автоматизация контроля качества функциональных материалов на основе средств интеллектуальной поддержки принятия решений : дис. ... канд. техн. наук : 05.13.06. – Пермь, 2015. – 162 с.
14. Automatic identification of the multiphase microstructures of steels based on ASPP-FCN / L. Xie, W. Li, L. Fan, M. Zhou // *Steel Research International*. – 2023. – Vol. 94. – 2200204. – DOI: 10.1002/srin.202200204.
15. Automated semantic segmentation of NiCrBSi-WC optical microscopy images using convolutional neural networks / D. Rose, J. Forth, H. Henein, T. Wolfe, A. J. Qureshi // *Computational Materials Science*. – 2022. – Vol. 210. – P. 111391. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111391.
16. Судьин В. В. Исследование особенностей разрушения низколегированных сталей и их сварных соединений в интервале вязко-хрупкого перехода : дис. ... канд. техн. наук : 01.04.07. – Москва, 2021. – 189 с.
17. Krizhevsky A., Sutskever I., Hinton G. E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks // *Communications of the ACM*. – 2017. – Vol. 60 (6). – P. 84–90. – DOI: 10.1145/3065386.
18. Лукашик Д. В. Анализ современных методов сегментации изображений // *Экономика и качество систем связи*. – 2022. – № 2 (24). – С. 57–65.
19. A deep learning model for automatic analysis of cavities in irradiated materials / Q. Chen, C. Zheng, Y. Cui, Y.-R. Lin, S. J. Zinkle // *Computational Materials Science*. – 2023. – Vol. 221. – 112073. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112073.
20. Hurtado J. V., Valada A. Semantic scene segmentation for robotics // *Deep Learning for Robot Perception and Cognition*. – Academic Press, 2022. – Ch. 12. – P. 279–311. – DOI: 10.1016/B978-0-32-385787-1.00017-8.
21. Xu H., Huang H. Plasma remelting and injection method for fabricating metal matrix composite coatings reinforced with tungsten carbide // *Ceramics International*. – 2022. – Vol. 48. – P. 2645–2659. – DOI: 10.1016/j.ceramint.2021.10.048.
22. ASTM E 562–02. Standard test method for determining volume fraction by systematic manual point count.
23. <https://siams.com/>
24. Kazakov A. A., Kiselev D. Industrial Application of thixomet image analyzer for quantitative description of steel and alloy's microstructure // *Metallography, Microstructure, and Analysis*. – 2016. – Vol. 5. – P. 294–301. – DOI: 10.1007/s13632-016-0289-6.
25. Schneider C. A., Rasband W. S., Eliceiri K. W. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis // *Nature Methods*. – 2012. – Vol. 9. – P. 671–675. – DOI: 10.1038/nmeth.2089.
26. <https://jmicrovision.github.io/>
27. Jacobs R. Deep learning object detection in materials science: current state and future directions // *Computational Materials Science*. – 2022. – Vol. 211. – 111527. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111527.
28. Unsupervised domain adaptation using generative adversarial networks for semantic segmentation of aerial images / B. Benjdira, Y. Bazi, A. Koubaa, K. Ouni // *Remote Sensing*. – 2019. – Vol. 11. – 1369. – DOI: 10.3390/rs11111369.
29. Wang M., Wu F., Zhao J. A Comprehensive research and strategy of transfer learning for image segmentation // *Lecture Notes on Data Engineering and Communications Technologies (LNDECT)*. – Springer, 2021. – Vol. 88. – P. 1394–1406. – DOI: 10.1007/978-3-030-70665-4\_152.
30. Аристов Г. В., Ключев А. В. Распознавание и классификация микроструктуры металлов и сплавов с использованием глубоких нейронных сетей // *Труды 27-й Международной конференции по компьютерной графике и машинному зрению (GRAPHI-CON 2017)*, Пермь, 24–28 сентября 2017 г. – ПГНИУ, 2017. – С. 180–183.



31. Полетаева Н. Г. Классификация систем машинного обучения // Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. Серия «Физико-математические и технические науки». – 2020. – № 1. – С. 5–22.
32. <https://habr.com/ru/companies/smartengines/articles/264677>
33. Аугментация наборов изображений для обучения нейронных сетей при решении задач семантической сегментации / И. А. Ложкин, М. Е. Дунаев, К. С. Зайцев, А. А. Гармаш // International Journal of Open Information Technologies. – 2023. – Vol. 11 (1). – P. 109–117.
34. Soboleva N., Mushnikov A. Improving the accuracy of semantic segmentation of carbides in the microstructure of composite coatings by the neural network // Materials Today Communications. – 2024. – Vol. 38. – P. 108276. – DOI: 10.1016/j.mtcomm.2024.108276.
35. Сикорский О. С. Обзор свёрточных нейронных сетей для задачи классификации изображений // Новые информационные технологии в автоматизированных системах. – 2017. – № 20. – С. 37–42.
36. Ronneberger, O., Fischer, P., Brox, T. U-Net: convolutional networks for biomedical image segmentation // Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI 2015). Lecture Notes in Computer Science series / ed. by N. Navab, J. Hornegger, W. Wells, A. Frangi. – Cham : Springer, 2015. – Vol. 9351. – DOI: 10.1007/978-3-319-24574-4\_28.
37. Badrinarayanan V., Kendall A., Cipolla R. SegNet: a deep convolutional encoder-decoder architecture for image segmentation // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. – 2017. – Vol. 39. – P. 2481–2495. – DOI: 10.1109/tpami.2016.2644615.
38. Long J., Shelhamer E., Darrell T. Fully convolutional networks for semantic segmentation // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Boston, MA, USA, 2015. – IEEE, 2015. – P. 3431–3440. – DOI: 10.1109/cvpr.2015.7298965.
39. Pyramid scene parsing network / H. Zhao, J. Shi, X. Qi, X. Wang, J. Jia // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Honolulu, HI, USA, 2017. – IEEE, 2017. – P. 6230–6239. – DOI: 10.1109/cvpr.2017.660.
40. RefineNet: multi-path refinement networks for high-resolution semantic segmentation / G. Lin, A. Milan, C. Shen, I. Reid // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Honolulu, HI, USA, 2017. – IEEE, 2017. – P. 5168–5177. – DOI: 10.1109/cvpr.2017.549.
41. DeepLab: semantic image segmentation with deep convolutional nets, atrous convolution, and fully connected CRFs / Chen L. C., Papandreou G., Kokkinos I., Murphy K., Yuille A. L. // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. – 2018. – Vol. 40, No. 4. – P. 834–848. – DOI: 10.1109/TPAMI.2017.2699184.
42. Rethinking atrous convolution for semantic image segmentation / L. C. Chen, G. Papandreou, F. Schroff, H. Adam. – 2017. – arXiv:1706.05587. – DOI: 10.48550/arXiv.1706.05587.
43. Соболева Н. Н., Мушников А. Н. Определение объемной доли первичных карбидов в микроструктуре композиционных покрытий с применением семантической сегментации // Frontier Materials & Technologies. – 2023. – № 3. – С. 95–102. – DOI: 10.18323/2782-4039-2023-3-65-9.
44. Convolutional neural networks: an overview and application in radiology / R. Yamashita, M. Nishio, R. K. G. Do, K. Togashi // Insights Imaging. – 2018. – Vol. 9. – P. 611–629. – DOI: 10.1007/s13244-018-0639-9.
45. Применение нейронных сетей глубокого обучения для решения задачи сегментации лесных пожаров на спутниковых снимках / К. В. Вик, А. А. Друки, Д. С. Григорьев, В. Г. Спицын // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2021. – № 55. – С. 18–25. – DOI: 10.17223/19988605/55/3.
46. On large-batch training for deep learning: generalization gap and sharp minima / N. Keskar, D. Mudigere, J. Nocedal, M. Smelyanskiy, P. Tang. – 2016. – arXiv:1609.04836. – DOI: 10.48550/arXiv.1609.04836.



47. A comparative study of loss functions for road segmentation in remotely sensed road datasets / H. Xu, H. He, Y. Zhang, L. Ma, J. Li // *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*. – 2023. – Vol. 116. – P. 103159. – DOI: 10.1016/j.jag.2022.103159.
48. Application of artificial intelligence technologies in metallographic analysis for quality assessment in the shipbuilding industry / V. Emelianov, A. Zhilenkov, S. Chernyi, A. Zinchenko, E. Zinchenko // *Heliyon*. – 2022. – Vol. 8. – P. e10002. – DOI: 10.1016/j.heliyon.2022.e10002.
49. Об автоматизированной системе детектирования дефектов на МЭМС-производстве / К. В. Ракетов, Н. Ю. Израилев, А. О. Казачков, Е. Ю. Заблоцкая, И. А. Род, М. С. Рябков, А. В. Исаченко, Д. Г. Шамирян // *Наноиндустрия*. – 2018. – Т. 11, № 7–8 (86). – С. 542–548. – DOI: 10.22184/1993-8578.2018.11.7-8.542.548.
50. <https://axalit.ru>
51. DLgram cloud service for deep-learning analysis of microscopy images / A. V. Matveev, A. V. Nartova, N. N. Sankova, A. G. Okunev // *Microscopy Research and Technique*. – 2024. – Vol. 87 (5). – P. 991–998. – DOI: 10.1002/jemt.24480.
52. [https://t.me/nanoparticles\\_nsk](https://t.me/nanoparticles_nsk)
53. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2023660789 Рос. Федерация. Определение объемной доли карбидов в структуре композиционных покрытий с помощью сверточной нейронной сети : № 2023660261 : регистрация 24.05.2023 : опубл. 24.05.2023 / Соболева Н. Н.

**Received:** 18.06.2024  
**Revised:** 06.08.2024  
**Accepted:** 16.08.2024  
**DOI:** 10.17804/2410-9908.2024.4.102-117

## MAKING A PARAMETER MAP FOR THE INELASTIC CYCLIC DEFORMATION OF COILED TUBING PIPES BY MEANS OF A DIGITAL MODEL OF TEST EQUIPMENT

V. B. Poroshin<sup>a,\*</sup> and A. N. Ufimtsev<sup>b</sup>

*South Ural State University, 76 Lenina Ave., Chelyabinsk, 454080, Russia*

<sup>a</sup>  poroshin2816@mail.ru;  
<sup>b</sup>  alehsa2@mail.ru

\*Corresponding author. Email: poroshin2816@mail.ru

Address for correspondence: Sverdlovskiy prospekt, 28a, apart. 139, Chelyabinsk, 454008 Russia  
Tel.: +7 (951) 794-0439

The accelerated resource testing technique is applied to the digital simulation of bench tests of coiled tubing pipes. Finite element models of the stand and a tube specimen are formed in the Ansys Mechanical package. By calculating the kinetics of the stress-strain state of the specimen, inelastic hysteresis loops for a stabilized cycle are obtained for a number of combinations of operating loads, namely internal pressure, pipeline weight, and the size of the guide device. Status maps are constructed therefrom, relating the parameters of inelastic deformation (alternating plastic flow, ratcheting of strain induced by alternating plastic flow) to loads. The use of the status maps makes possible reasonable planning of real experimental research programs to simulate the required form of coiled tubing failure under operating conditions, and this significantly reduces time, labor, and material costs.

**Keywords:** coiled tubing, digital model of the test bench and the specimen, calculation of the kinetics of alternating inelastic deformation, Ansys Mechanical FEM package, ratcheting of plastic strain, alternating plastic flow, parameter map of inelastic cyclic deformation

### References

1. Kuznetsov, N.D. and Tseytlin, V.I. *Ekvivalentnyye ispytaniya gazoturbinnnykh dvigateley* [Equivalent Tests of Gas Turbine Engines]. Mashinostroenie Publ., Moscow, 1976, 214 p. (In Russian).
2. Gokhfeld, D.A., Getsov, L.B., Kononov, K.M., Kulchikhin, E.T., Rebyakov, Yu.N., Sadakov, O.S., Timashev, S.A., and Chepuriskiy, V.N. *Mekhanicheskie svoystva staley i splavov pri nestatsionarnom nagruzhении*. Spravochnik [Mechanical Properties of Steels and Alloys under Non-Stationary Loading: Handbook]. UrO RAN Publ., Ekaterinburg, 1996, 408 p. (In Russian).
3. Qian-Bei, Y., Guohao, S., Gang, W., Jubao, L., Ming, Y., and Qiang, Z. Experimental study on the influence of bending and straightening cycles for non-destructive and destructive coiled tubing. *Engineering Failure Analysis*, 2021, 123, 105218. DOI: 10.1016/j.engfailanal.2021.105218.
4. Poroshin, V.B., Buksbaum, V.B., and Druzhinin, P.S. Technique for forecasting the operating life of coil tubing on the basis of laboratory and bench tests. *Vestn. Yuzhno-Ural. Gos. Un-ta. Ser. Matem. Mekh. Fiz.*, 2014, 6 (3), 72–77. (In Russian).
5. Ilyinykh, V.N. and Syzrantsev, V.N. Construction of a mathematical model for describing the data of low-cycle fatigue tests. In: *Fundamentalnaya nauka i tekhnologii – perspektivnyye razrabotki: materialy mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii* [International Scientific-

Practical Conference “Fundamental Science and Technologies – Advanced Development”, Moscow, May 22–23, 2013: Proceedings]. Moscow, 2013, pp. 224–226. (In Russian).

6. Poroshin, V.B. and Ufimtsev, A.N. The test bench digital model and FEM-analysis for the kinetics of a stress-strain state of coiled tubing specimens. In: *Vserossiyskaya nauchnaya konferentsiya s mezhdunarodnym uchastiem “Tsifrovaya industriya: sostoyaniye i perspektivy razvitiya TSISP’2023”* [2023 Global Smart Industry Conference, Chelyabinsk, November 21–23, 2023: Collection of Scientific Papers]. Chelyabinsk, YuUrGU Publ., 2024, pp. 377–386. (In Russian). Available at: <http://omega.sp.susu.ru/glosic2023/articles/039.pdf>

7. [http://help/ans\\_elem/Hlp\\_E\\_SHELL181.html](http://help/ans_elem/Hlp_E_SHELL181.html)

8. Ramberg, W. and Osgood, W.R. Description of stress–strain curves by three parameters, NACA–TN–902, 1943, 32 p.



Подана в журнал: 18.06.2024  
УДК 621.774.3:620.178  
DOI: 10.17804/2410-9908.2024.4.102-117

## ПОСТРОЕНИЕ КАРТЫ ПАРАМЕТРОВ НЕУПРУГОГО ЦИКЛИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ КОЛТЮБИНГОВЫХ ТРУБ С ПОМОЩЬЮ ЦИФРОВОЙ МОДЕЛИ ИСПЫТАТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ

В. Б. Порошин<sup>а, \*</sup>, А. Н. Уфимцев<sup>б</sup>

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
«Южно-Уральский государственный университет»,  
просп. Ленина, 76, Челябинск, 454080, Россия

<sup>а</sup> ✉ poroshin2816@mail.ru;  
<sup>б</sup> ✉ alehsa2@mail.ru

\*Ответственный автор. Электронная почта: poroshin2816@mail.ru  
Адрес для переписки: Свердловский просп., 28а, кв. 139, Челябинск, 454008, Россия  
Телефон: +7 (951) 794-04-39

Методика ускоренных ресурсных испытаний применена к цифровому моделированию стендовых испытаний колтюбинговых труб. В пакете Ansys Mechanical сформированы конечно-элементные модели стенда и образца трубы. Расчетом кинетики напряженно-деформированного состояния образца получены петли неупругого гистерезиса для стабилизированного цикла при ряде сочетаний эксплуатационных нагрузок: внутреннего давления, веса трубной плети, размера направляющего устройства. На этой основе построены карты состояний, связывающие параметры неупругого деформирования (знакопеременное пластическое течение, одностороннее накопление деформации на фоне знакопеременного пластического течения) с нагрузками. Использование карт состояний позволяет обоснованно спланировать программы реальных экспериментальных исследований для моделирования требуемого вида выхода колтюбинга из строя в условиях эксплуатации, что существенно сокращает временные, трудовые и материальные затраты.

**Ключевые слова:** колтюбинг, цифровая модель испытательного стенда и образца, расчет кинетики повторно-переменного неупругого деформирования, пакет МКЭ Ansys Mechanical, одностороннее накопление пластической деформации, знакопеременное пластическое течение, карта параметров неупругого циклического деформирования

### 1. Введение

Термин «колтюбинг» (*coiled tubing*) относится как к одной из прогрессивных технологий современного нефтегазового промысла, так и к ее основному объекту – длинной гибкой трубе, разматываемой с барабана и опускаемой в скважину на глубину до 1,5...2 км и более.

В процессе эксплуатации трубная плеть испытывает интенсивное воздействие повторно-переменного циклического изгиба, внутреннего давления и растяжения весом трубы. Это обстоятельство определяет весьма ограниченный ресурс объекта (80...300 типовых спуско-подъемных операций, в зависимости от марки стали, сочетания нагрузок и их интенсивности). Те же факторы влияют и на характер деформирования в отдельных областях трубы: знакопеременное пластическое течение или одностороннее накопление деформации на фоне повторно-переменного неупругого деформирования. Обусловленное этими процессами образование трещин малоциклового усталости грозит обрывом трубной плети, что неизбежно повлечет многомиллионные потери, определяемые как стоимостью самой трубы, так и выводом из эксплуатации заглушенной скважины.

Одним из путей предотвращения подобных негативных последствий являются эквивалентные ресурсные испытания или испытания на подтверждение ресурса, методика организации и проведения которых детально отработана в практике проектирования и доводки авиационных ГТД [1]. Такие испытания – вначале отдельных узлов, а затем изделия в целом – проводятся на специальных стендах.

Аналогично на специализированных стендах испытывают образцы, вырезанные из трубной плети, вновь изготовленной или с наработкой. Такие стенды уникальны, разнообразны по конструкции и возможностям. Они существуют лишь в отдельных организациях, например в Клаустальском техническом университете (Германия), университете города Талса (США), Тюменском государственном нефтегазовом университете, предприятии ОАО «Уралтрубмаш» (г. Челябинск). Вместе с тем надо признать, что такие испытания трудоемки, продолжительны и дороги. Существенно сократить их объем за счет выбора представительных программ нагружения, воспроизводящих предельные состояния колонны гибких труб (КГТ), наблюдаемые в условиях эксплуатации, позволили бы адекватные цифровые модели стенда и образца.

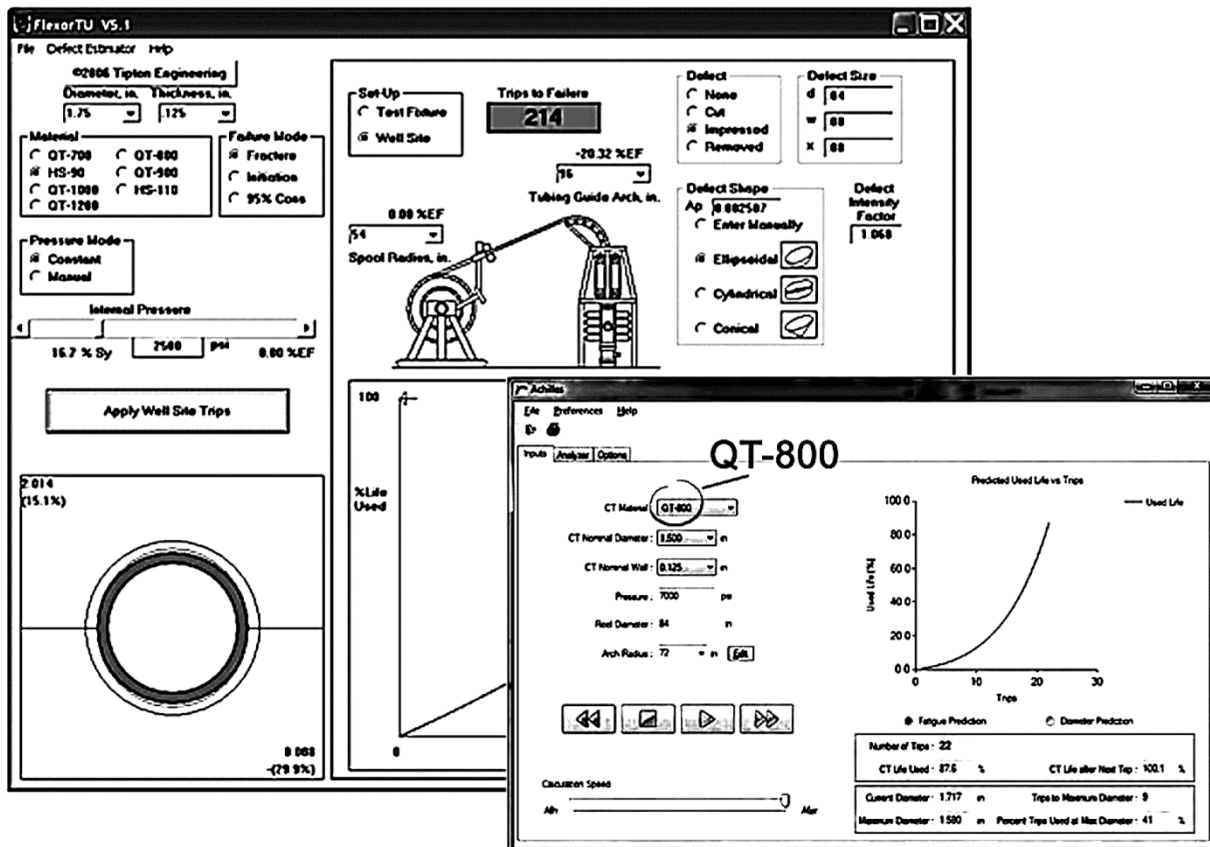


Рис. 1. Окна задания исходных данных в одном из зарубежных программных комплексов

Анализ доступных литературных источников показал, что в этой области практика, к сожалению, значительно опережает теорию, так как не существует не только соответствующих отраслевых нормативных документов, но и единой методики оценки остаточного ресурса и долговечности КГТ. Отечественные разработки (ведущиеся, в частности, в Тюменском нефтегазовом государственном университете) отличаются недостаточной, на наш взгляд, адекватностью используемых математических моделей деформационных и прочностных свойств металлических материалов в условиях повторно-переменного нагружения. Коммерческие программные комплексы (как правило, зарубежные – CTLife, FACT, Cerberus и другие), хоть и обещают решение многих проблем, носят закрытый характер, поэтому ана-

лиз и оценка используемых в них подходов затруднительны. В показанном на рис. 1 примере (окно Inputs модуля Achilles) свойства материала определяются маркой стали, механические характеристики которой «защиты» в соответствующей базе данных пакета. Следовательно, если нужная марка стали, скажем, отечественного производства, в библиотеке отсутствует, такой пакет оказывается бесполезен. К тому же в большинстве известных нам зарубежных программных продуктов в качестве механических характеристик материала используются показатели прочности и деформационных свойств, отвечающие *монотонному однократному* статическому нагружению, что не соответствует характеру деформирования материала реального объекта.

В ряде работ результаты испытания образцов труб сопоставляются с данными анализа напряженно-деформированного состояния (НДС) и оценкой долговечности, полученными в аналитическом виде или расчетным путем (обычно методом конечных элементов) [3–5]. Логичным развитием такого подхода представляется моделирование всего комплекса в целом: образца, испытательного оборудования и самого процесса испытания (в этом случае практически отсутствуют ограничения на конструкцию стенда, виды нагрузок и их величину), однако число такого рода публикаций крайне невелико.

Таким образом, целью предпринятого исследования, представляющего развитие работы [6], является разработка цифровой модели испытательного комплекса, анализ процесса неупругого деформирования материала с использованием адекватной математической модели деформационных свойств инкрементального типа [2] и построение карты состояний, связывающей параметры неупругого деформирования (знакопеременного пластического течения, одностороннего накопления деформации на фоне знакопеременного пластического течения) с нагрузками, что позволит существенно сократить временные, трудовые и материальные затраты при выборе режимов реальных испытаний, имитирующих актуальные случаи выхода колтюбинга из строя в условиях эксплуатации.

## 2. Деформационные характеристики материала и методика моделирования

В лаборатории кафедры «Техническая механика» Южно-Уральского государственного университета были проведены испытания плоских образцов из трубной стали А606-4 (США) при однократном монотонном и блочном циклическом нагружении с увеличивающимся от блока к блоку размахом деформации. В каждом блоке испытания велись в режиме жесткого симметричного по деформациям нагружения до стабилизации процесса деформирования. Обработкой результатов получены диаграмма деформирования  $\sigma$ – $p$  при начальном нагружении (для краткости – статическая кривая), кривая циклического деформирования в осях «изменение напряжения с момента реверса скорости деформации ( $\sigma_*$ ) – изменение пластической деформации ( $p_*$ )» и циклическая кривая «амплитуда напряжения  $\sigma_a$  – амплитуда пластической деформации  $p_a$ » ( $p \equiv \varepsilon_p$  – неупругая составляющая полной деформации), рис. 2. Кривая циклического деформирования представляет траекторию движения точки состояния в пространстве «напряжение – деформация» и описывает, таким образом, петлю неупругого гистерезиса. Циклическая кривая в этих условиях отражает изотропное упрочнение материала в процессе циклического деформирования. Ее вид зависит от материала (т. е. химического состава), начального состояния объекта (термообработки, наклепа, наличия остаточных напряжений и т. п.), коэффициента асимметрии цикла и, как видно на графике, от амплитуды пластической деформации. Наибольшее различие, особенно при значительных величинах пластической деформации, наблюдается между начальной кривой и диаграммой циклического деформирования (см. рис. 2). Таким образом, распространенная в расчетах практика – использование характеристик материала, снятых с диаграммы при однократном монотонном нагружении – может привести к существенным погрешностям. В условиях «мягкого» нагружения – к ошибке «в запас» по неупругой деформации, что может повлечь

неоправданно заниженную оценку долговечности и снятие с эксплуатации вполне работоспособного изделия. При «жестком» нагружении – к ошибке «не в запас» по действующим напряжениям.

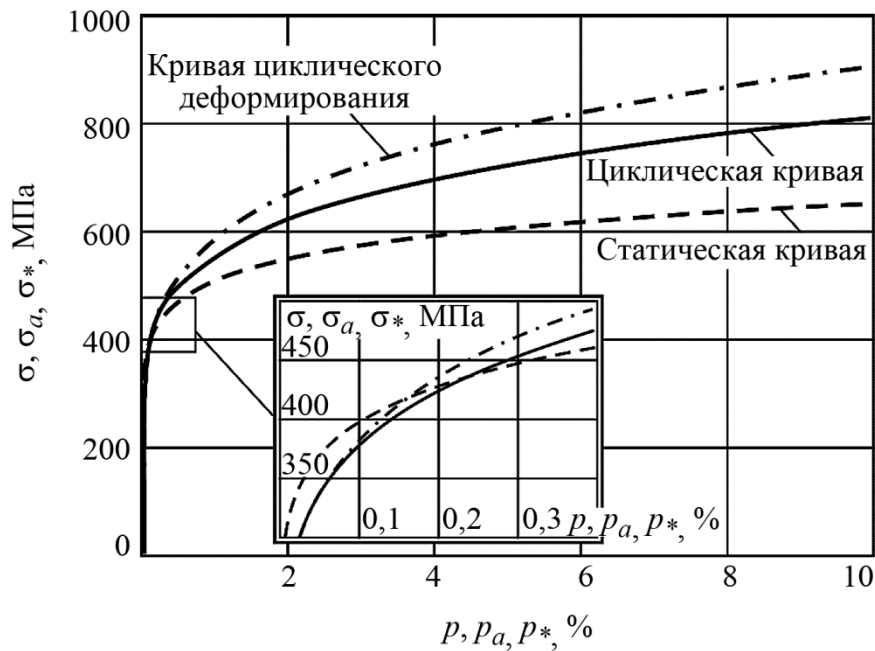


Рис. 2. Сопоставление кривой циклического деформирования, циклической кривой и диаграммы деформирования при однократном нагружении трубной стали А606-4 (неопубликованные данные Ю. Н. Ребякова)

Забегая вперед, заметим, что в результате анализа изменения компонент напряженно-го состояния в девиаторном пространстве в течение цикла установлено, что нагружение образца трубы оказалось близко к пропорциональному. Это обстоятельство позволяет считать, что характеристики деформационных свойств стали, полученные экспериментально в условиях линейного напряженного состояния, могут быть вполне корректно использованы при расчете кинетики НДС при действии всех эксплуатационных нагрузок.

В течение одного типового технологического цикла (спуско-подъемной операции) отдельные области трубы несколько раз подвергаются неупругому знакопеременному деформированию: во время спуска – при размотке трубы с барабана, изгибе на дуге направляющего устройства, выпрямлении в инжекторе и далее, при погружении в скважину и подаче давления; во время подъема – при прохождении через направляющую дугу, выпрямлении после направляющей и, наконец, при намотке на барабан. Отмечается, что внутреннее давление совместно с переменными изгибающими нагрузками приводит к овализации трубы. В процессе эксплуатации на трубу действует также осевая растягивающая нагрузка от собственного веса. Это воздействие необходимо учитывать как при построении модели стенда, так и при моделировании испытаний образца, поскольку оно определяет квазистатическое повреждение, связанное с односторонним накоплением деформации, влияющее на долговечность и надежность колтюбинга. История изменения деформации в одной из точек сечения трубы для одного технологического цикла показана на рис. 3.



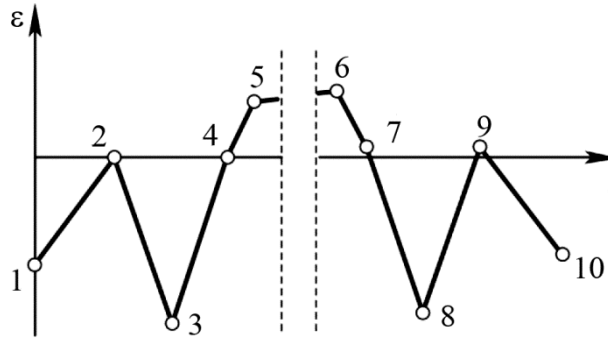


Рис. 3. Схема деформирования материала в опасной точке опасного сечения трубы в типичном технологическом цикле: 1–2 – размотка с барабана; 2–3 – изгиб на направляющей; 3–4 – выпрямление после схода с направляющей; 4–5 – приложение эксплуатационных нагрузок; 5–6 – технологический процесс; 6–7 – снятие нагрузок; 7–8 – изгиб на направляющей; 8–9 – выпрямление после направляющей; 9–10 – намотка на барабан

Спроектированной установкой (рис. 4) осуществляется нагружение кинематического типа перемещением оправок 2 с помощью гидроцилиндров 4 с прямым и обратным ходом штока в сочетании с силовым нагружением путем растяжения образца с помощью гидроцилиндра 3, имитирующего вес трубной плети. В испытании может быть реализован симметричный знакопеременный изгиб образцов длиной 2 м вокруг оправок радиусом 1200 мм. Цикл нагружения включает растяжение образца трубы с помощью гидроцилиндра, имитирующего вес плети КГТ, изгиб изначально прямой трубы, определяемый радиусом кривизны оправок, распрямление, изгиб в противоположном направлении и выпрямление в исходное состояние. Установка допускает замену оправок на другие, с иными радиусами кривизны, например в случае использования барабана другого диаметра, что позволяет изменять параметры деформирования. Таким образом, возможна реализация несимметричного повторно-переменного изгиба. Конструкция стенда, наряду со знакопеременным упруго-пластическим изгибом, предусматривает также нагружение образца внутренним давлением, что приведет к появлению дополнительных растягивающих окружных и осевых напряжений.

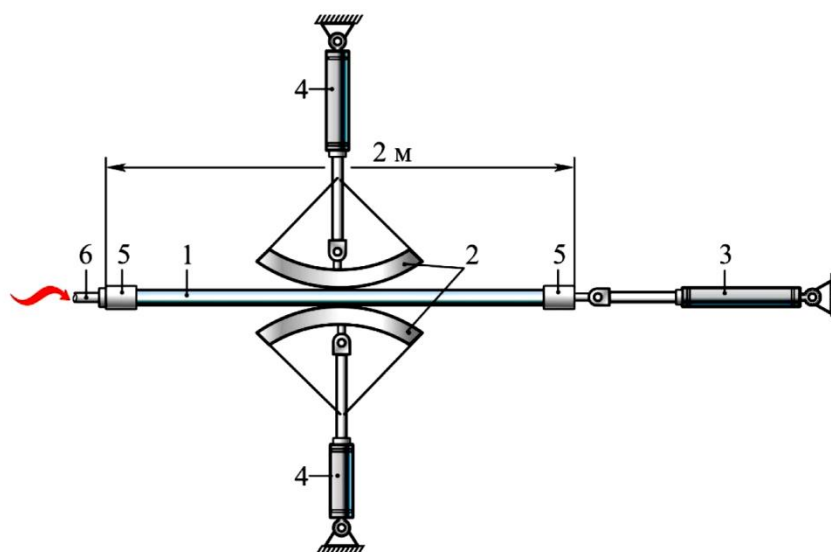


Рис. 4. Схема испытательного стенда: 1 – образец; 2 – жесткие оправки; 3 – гидроцилиндр, имитирующий вес трубной плети; 4 – гидроцилиндр с прямым и обратным ходом штока; 5 – герметичный захват; 6 – штуцер для подачи рабочей жидкости

В ходе численного моделирования испытания в условиях знакопеременного изгиба образца в пакете Ansys APDL был разработан программный модуль, предназначенный для расчета неупругого деформирования фрагмента гибкой трубы с учетом реальных свойств материала и геометрии объекта. На рис. 5 представлена конечно-элементная модель, включающая абсолютно жесткие оправки и фрагмент трубы.

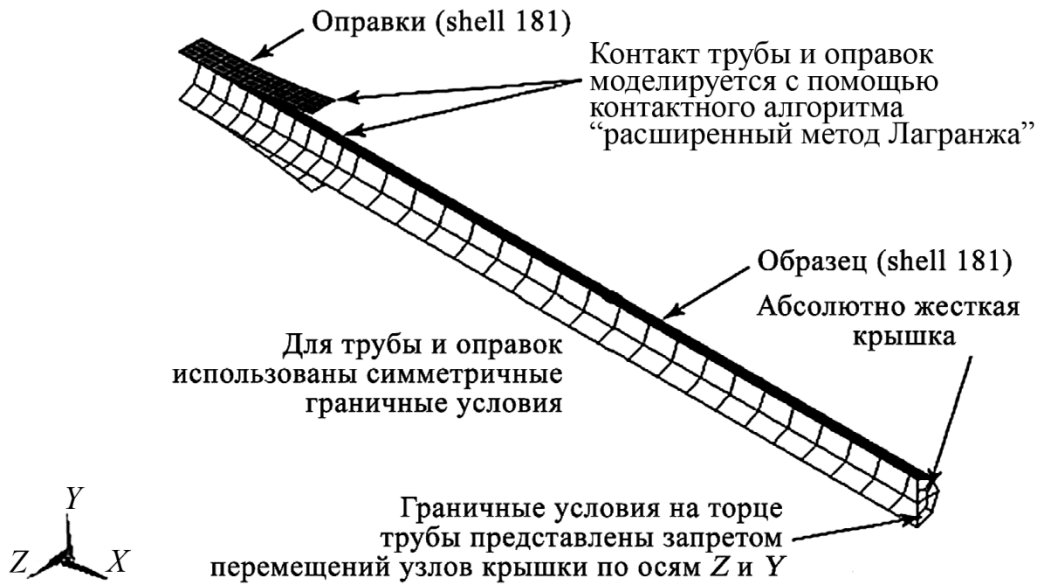


Рис. 5. МКЭ-модель образца трубы и оправок

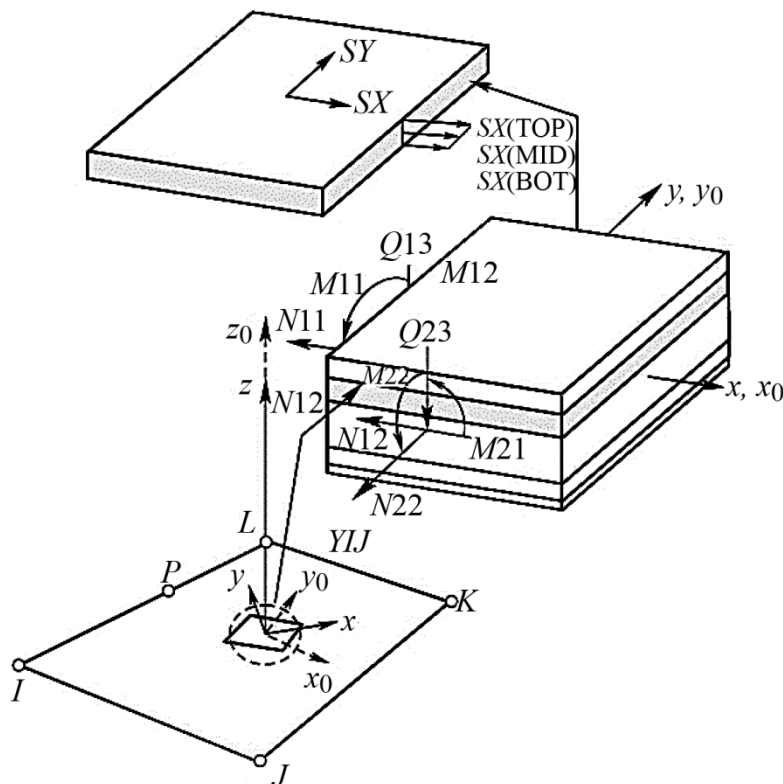


Рис. 6. Конфигурация конечного элемента Shell 181, расположение его узлов, положение координатных осей и внутренние силовые факторы в элементе, учитываемые в расчете [7]

Моделью испытательной установки воспроизводятся радиусы кривизны оправок и условия закрепления трубы, предусмотрена возможность приложения внутреннего давления, а также растяжение образца осевой силой. Оправки станда для сокращения времени расчета моделируются плоскими элементами Shell 181 с меньшим, чем у solid-элементов, числом узлов; их материал полагается абсолютно жестким в соответствии с естественным допущением о значительно большей жесткости элементов станда по сравнению с жесткостью испытываемого образца.

Фрагмент гибкой трубы также моделировали с помощью элементов Shell 181 (рис. 6). Этот элемент пригоден для воспроизведения оболочек с заданной толщиной стенки и позволяет вести расчеты за пределами упругости, в том числе с учетом больших перемещений. Поскольку нагружение объекта изгибом носит кинематический характер (реализуется так называемый жесткий цикл), то гидроцилиндрам оправок испытательной установки задается синхронное перемещение по оси  $Y$ . Труба при этом изгибается и деформируется до полного контакта с оправками. Закрепление образца моделировали запретом линейных перемещений узлов на торце трубы вдоль оси  $Z$  и  $Y$  и запретом поворотов тех же узлов относительно осей  $X$  и  $Y$ . Осевая сила, определяющая растяжение образца, приложена к торцу трубы. Закрепление оправок моделировали запретом перемещений узлов по осям  $Z$  и  $X$  и поворотов тех же узлов относительно осей  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ .

С учетом симметрии задачи, для снижения трудоемкости расчетов моделировалась лишь четверть конструкции. В граничных условиях также учитывалась симметрия системы. При решении задачи использованы контактные алгоритмы, позволяющие с помощью специальных элементов описать контакт поверхности трубы и оправок. Рисунок 7 иллюстрирует отдельные этапы изгиба трубы на оправках.

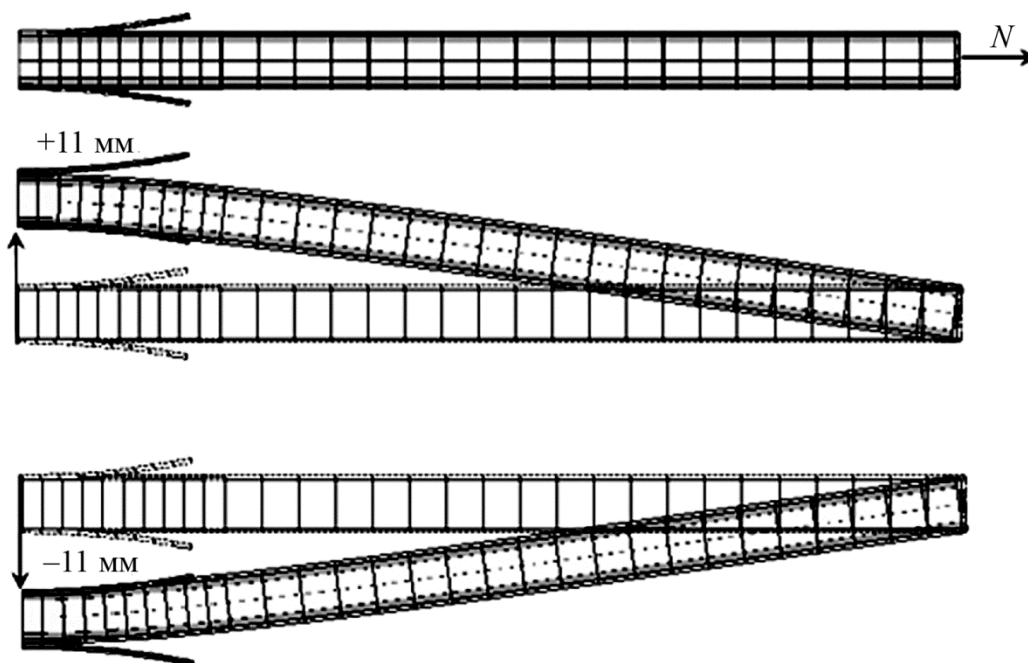


Рис. 7. Вид изгибаемого образца на отдельных этапах расчета

### 3. Результаты и обсуждение

Анализ кинетики напряженно-деформированного состояния образца трубы производили на основе результатов поциклового расчета до стабилизации процесса неупругого деформирования в условиях циклического знакопеременного изгиба, нагружения внутренним рабочим давлением 20 МПа и растягивающей силой разной величины. В ходе расчетов находили наиболее

нагруженное сечение объекта, а в нем – наиболее опасную точку, в которой реализуются наибольший размах неупругой деформации и наибольшая односторонне накопленная неупругая деформация. Считается, что первый фактор – размах неупругой деформации – определяет так называемое усталостное повреждение, а второй – его квазистатическую составляющую. В выявленных таким образом опасных точках по данным расчета в каждом шаге по времени были построены петли неупругого гистерезиса, соответствующие стабильному циклу.

В связи с этим возникает вопрос: на основе какой из трех, вернее двух, диаграмм деформирования следует производить расчет? Наиболее корректные результаты получаются с использованием кривой циклического деформирования (см. рис. 2) при условии, что она соответствует размаху деформации (напряжения), реализующегося в конструкции. Разумеется, эта величина заранее неизвестна, поэтому приемлемым компромиссом представляется циклическая кривая, которую получают при ряде значений размаха деформации в стабильном цикле, а при выполнении расчетов часто аппроксимируют по Рамбергу – Осгуду [8].

Установлено, что в опасных точках трубчатого образца компоненты НДС изменяются от цикла к циклу как по величине, так и по знаку. При кинематическом циклическом нагружении оправками определенного радиуса в элементах объема наиболее нагруженного сечения в отдельные моменты времени реализуется как растягивающая, так и сжимающая деформация.

Качественное влияние на поведение конструкции оказывает комбинация нагрузок, в частности циклически изменяющийся изгибающий момент с постоянной растягивающей силой. Осевое удлинение колонны гибких насосно-компрессорных труб может значительно снизить их ресурс (до сотен и даже десятков циклов, что соответствует области малоциклового и ультрамалоциклового усталости), особенно при наличии так называемой циклической ползучести, вызывающей продолжающееся от цикла к циклу изменение границы зоны неупругого деформирования. В условиях только лишь знакопеременного изгиба по абсолютно жестким оправкам заданного радиуса в опасной точке реализуется кинематический тип нагружения, приводящий к знакопеременному течению материала. В результате стабилизации полей остаточных напряжений цикл становится симметричным как по напряжениям, так и по деформациям (рис. 8).

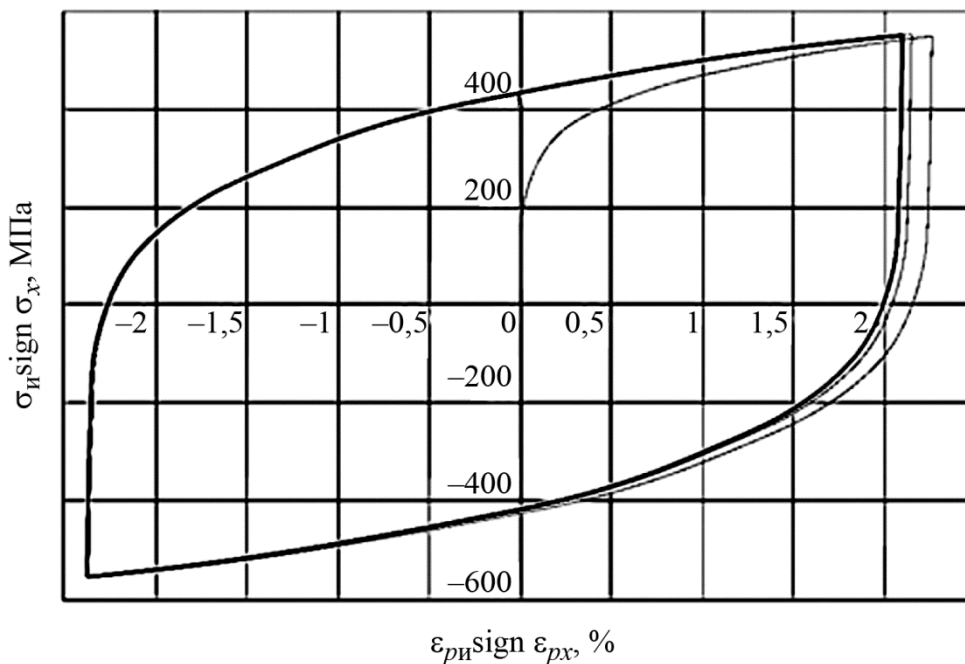


Рис. 8. Результаты расчета кинетики неупругого деформирования до стабилизации цикла, соответствующего знакопеременному пластическому течению (знакопеременный изгиб по оправкам заданного радиуса в отсутствие осевой силы и внутреннего давления)



На рис. 9–12 представлены петли неупругого гистерезиса, иллюстрирующие кинетику НДС в наиболее нагруженной точке (для наглядности петли построены в осях «интенсивность напряжений  $\sigma_{и\text{sign}}$  – интенсивность неупругой деформации  $\varepsilon_{рн\text{sign}}$ », которым присвоен знак наибольшей по модулю компоненты), при совместном воздействии на трубчатый образец внутреннего рабочего давления и осевой растягивающей силы.

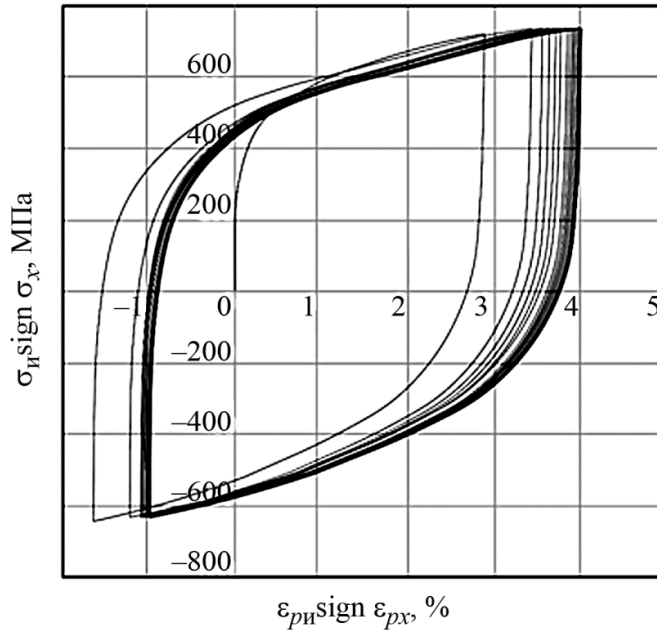


Рис. 9. Результаты расчета кинетики неупругого деформирования до стабилизации цикла, соответствующего одностороннему накоплению деформации на фоне знакопеременного пластического течения (знакопеременный изгиб на оправках, растяжение осевой силой, равной 37,5 кН, от собственного веса трубы длиной 750 м, рабочее давление 20 МПа)

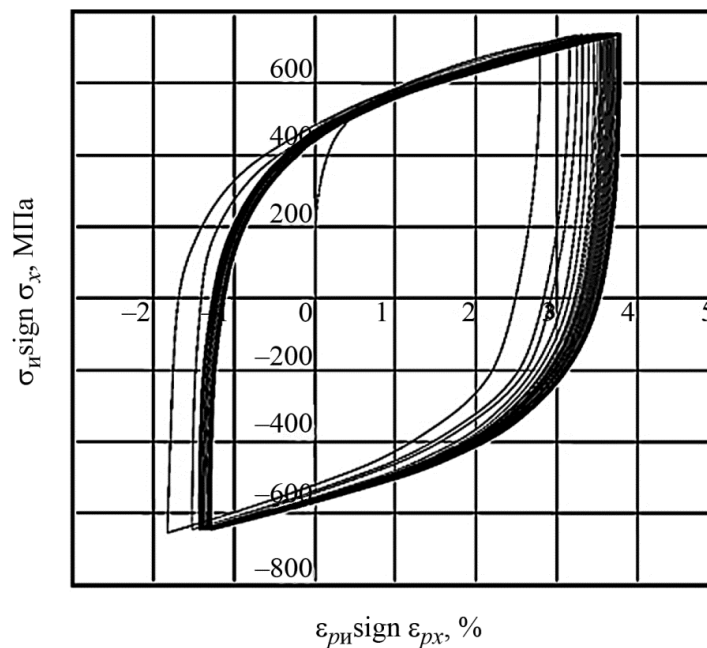


Рис. 10. Результаты расчета кинетики неупругого деформирования до стабилизации цикла, соответствующего одностороннему накоплению деформации на фоне знакопеременного пластического течения (знакопеременный изгиб на оправках, растяжение осевой силой 50 кН от собственного веса трубы длиной 1000 м, давление 20 МПа)

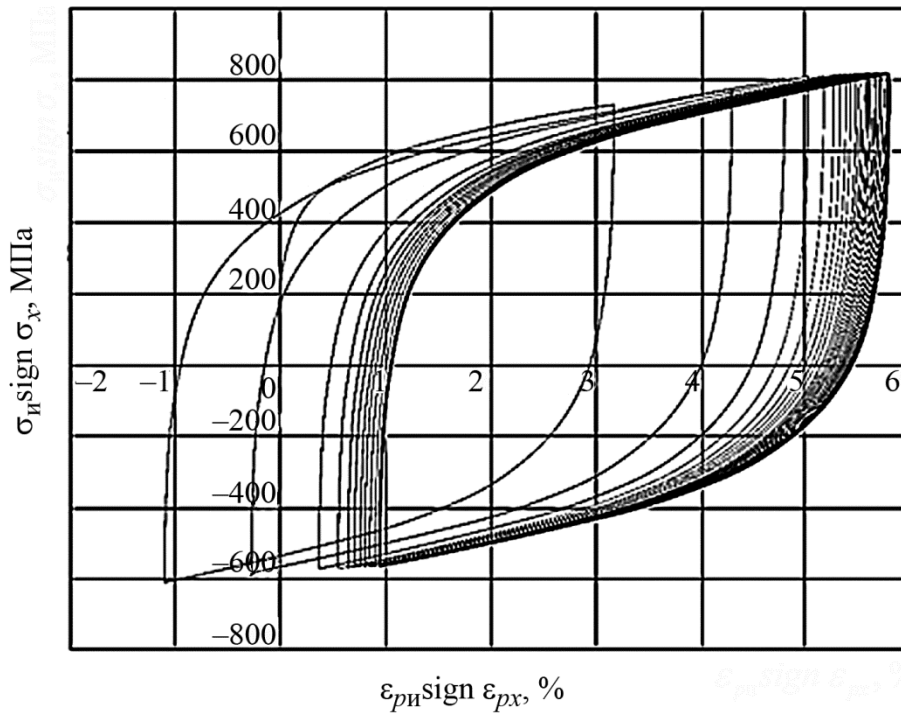


Рис. 11. Результаты расчета кинетики неупругого деформирования до стабилизации цикла, соответствующего одностороннему накоплению деформации на фоне знакопеременного пластического течения (знакопеременный изгиб на оправках, растяжение осевой силой, равной 100 кН, от собственного веса трубы длиной 2000 м, давление 20 МПа)

Как видно, приложение последней приводит к сдвигу петли в процессе стабилизации цикла с изменением компонент деформации и, соответственно, размаха интенсивности неупругой деформации. Одностороннее накопление деформации постепенно (после 20–25 циклов нагружения) прекращается, и петли гистерезиса замыкаются. Как видно, центр диаграммы неупругого деформирования оказывается смещенным в область растягивающих деформаций. Это означает, что при расчете квазистатического повреждения, связанного с односторонне накопленной деформацией, следует использовать ресурс пластичности материала, соответствующий именно такому виду напряженного состояния.

Как видно, дополнительная нагрузка приводит к изменению компонент  $\epsilon_{px}$ ,  $\epsilon_{pt}$ ,  $\epsilon_{pr}$  пластической деформации не только по величине, но и по знаку. Сравнением размахов интенсивности пластической деформации в случае наибольшей нагруженности объекта (знакопеременным изгибом с растягивающей силой) с более простым случаем, когда реализуется лишь знакопеременный изгиб, обнаружили несколько неожиданный эффект: снижение размаха интенсивности пластической деформации. В этой ситуации прогноз долговечности предсказал бы противоречащее здравому смыслу увеличение числа циклов до разрушения. По-видимому, данное обстоятельство связано с формулировкой зависимости для определения интенсивности пластической деформации:

$$\epsilon_{pн} = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(\epsilon_{px} - \epsilon_{pt})^2 + (\epsilon_{pt} - \epsilon_{pr})^2 + (\epsilon_{pr} - \epsilon_{px})^2} .$$

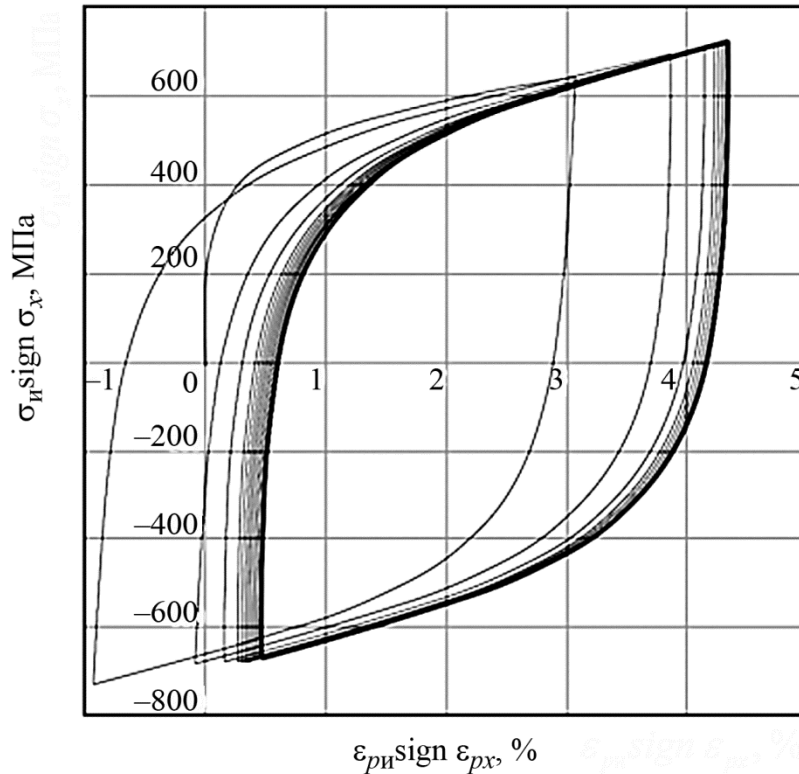


Рис. 12. Результаты расчета кинетики неупругого деформирования до стабилизации цикла, соответствующего одностороннему накоплению деформации на фоне знакопеременного пластического течения (знакопеременный изгиб на оправках, растяжение осевой силой, равной 1000 кН, от собственного веса трубы длиной 2000 м, давление отсутствует)

При приложении дополнительной нагрузки в процессе расчета кинетики НДС компоненты осевой, окружной, радиальной пластической деформации, изменяясь, могут оказаться близки друг к другу, тогда размах интенсивности пластической деформации будет уменьшаться, в отдельных случаях стремясь к нулю. Таким образом, возникает неожиданная ситуация: дополнительная нагрузка приводит к снижению нагруженности материала в опасной точке и, как следствие, к увеличению ресурса. Во избежание подобного парадокса при оценке долговечности вместо *размаха интенсивности пластической деформации*  $\Delta \epsilon_{р и} = \epsilon_{р и i} - \epsilon_{р и j}$ , рядом авторов используется *интенсивность размахов компонент пластической деформации*:

$$\epsilon_{и \Delta p} = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(\Delta \epsilon_{рх} - \Delta \epsilon_{рt})^2 + (\Delta \epsilon_{рt} - \Delta \epsilon_{рr})^2 + (\Delta \epsilon_{рr} - \Delta \epsilon_{рх})^2}$$

где  $\Delta \epsilon_{рх} = \epsilon_{рхmax} - \epsilon_{рхmin}$ ,  $\Delta \epsilon_{рt} = \epsilon_{рtmax} - \epsilon_{рtmin}$ ,  $\Delta \epsilon_{рr} = \epsilon_{рrmax} - \epsilon_{рrmin}$  – размахи неупругой осевой, окружной и радиальной деформации соответственно – параметра не вполне физического, так как размахи составляющих пластической деформации – осевой  $\Delta \epsilon_{рх}$ , окружной  $\Delta \epsilon_{рt}$  и радиальной  $\Delta \epsilon_{рr}$  – зачастую реализуются неодновременно. Нетрудно видеть, что и в такой формулировке не гарантируется отсутствие упомянутого выше парадокса. В такой ситуации для характеристики интенсивности деформирования может быть использован так называемый среднеквадратичный размах неупругой деформации

$$\overline{\Delta \epsilon_p} = \sqrt{\Delta \epsilon_{рх}^2 + \Delta \epsilon_{рt}^2 + \Delta \epsilon_{рr}^2}$$

который можно интерпретировать как длину вектора в трехмерном пространстве размахов компонент неупругой деформации – параметр также нефизичный, однако гарантирующий качественное соответствие интенсивности деформирования и долговечности.

Наконец, практический интерес представляют карты состояний, отражающие связь вида и параметров неупругого деформирования (знакопеременное пластическое течение, одностороннее накопление деформации на фоне знакопеременного пластического течения) с нагрузками, построенные по результатам расчетов кинетики напряженно-деформированного состояния образцов при ряде сочетаний эксплуатационных нагрузок. Использование карт состояний существенно сокращает затраты сил, времени и средств при выборе режимов реальных испытаний, имитирующих актуальные виды выхода кольтюбинга из строя в условиях эксплуатации. Миниатюры таких карт приведены на рис. 13; при построении использован вполне представительный набор данных (результаты отдельных поцикловых расчетов кинетики НДС до стабилизации). На рис. 14 показана аналогичная карта состояния применительно к связи среднеквадратичного размаха компонент неупругой деформации с перемещением оправок и длиной трубной плети при фиксированном внутреннем давлении 20 МПа.

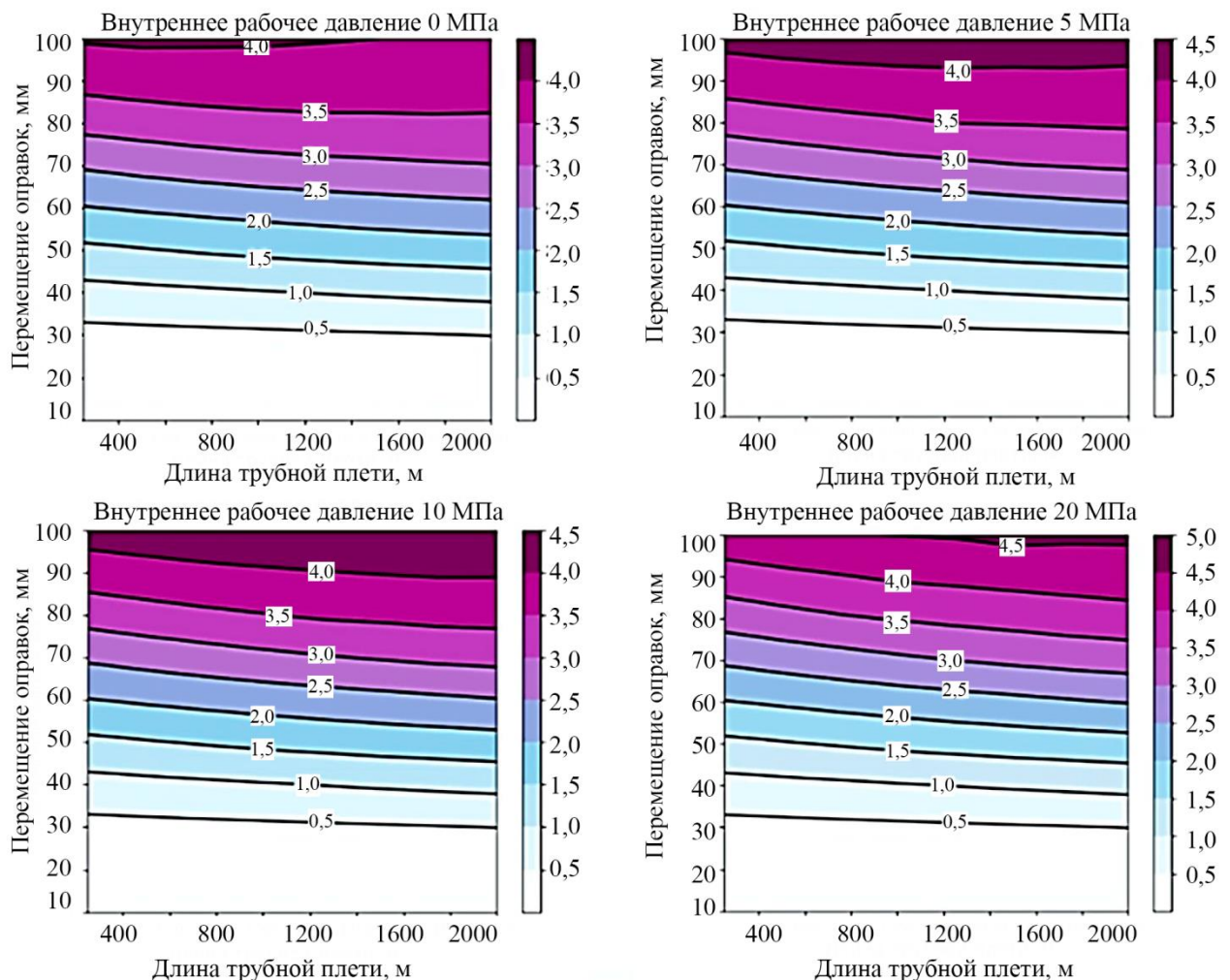


Рис. 13. Карты состояния, иллюстрирующие связь интенсивности размахов компонент неупругой деформации с перемещением оправок и длиной трубной плети при ряде значений внутреннего давления



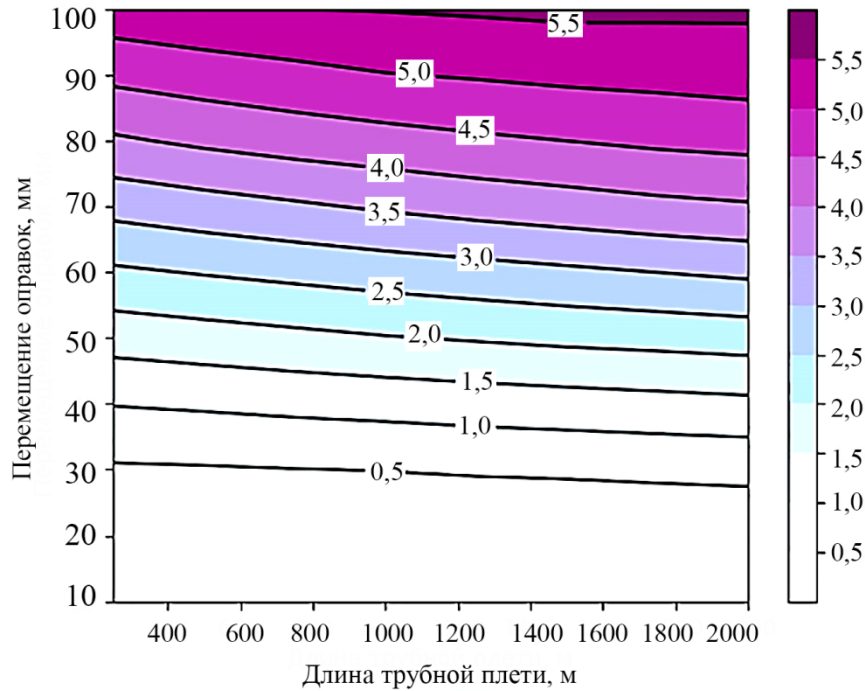


Рис. 14. Карта состояния, иллюстрирующая связь среднеквадратичного размаха компонент неупругой деформации с перемещением оправок и длиной трубной плети (давление 20 МПа)

#### 4. Заключение

Резюмируя вышеизложенное, отметим отличительные черты представленного исследования.

Работа посвящена цифровому моделированию стендовых испытаний колтюбинговых труб. Такой прием позволяет существенно сократить трудоемкость, продолжительность и стоимость реальных испытаний за счет выбора представительных программ нагружения, воспроизводящих предельные состояния трубы в условиях эксплуатации, что свидетельствует об актуальности рассматриваемой научной проблемы.

Научная новизна полученных результатов состоит в том, что исследованы закономерности неупругого деформирования образцов трубы из стали А606-4 с учетом реальных деформационных свойств при циклическом нагружении, определены типы и параметры этого процесса при различных сочетаниях нагрузок и интенсивности их воздействия, результаты представлены в виде карт состояния.

Работа имеет практическое значение: разработана цифровая модель испытательного комплекса, построены карты состояний, связывающие параметры неупругого деформирования с нагрузками и позволяющие обоснованно спланировать программу экспериментальных исследований, моделирующих различные состояния колтюбинга в эксплуатации. Результаты исследования могут быть полезны производителям труб при назначении гарантийного срока службы изделия, а для эксплуатирующих организаций – при оценке остаточного ресурса.

Достоверность результатов обеспечивается использованием экспериментально полученных деформационных свойств стали при циклическом нагружении, адекватной математической модели деформационных свойств и общепризнанного численного метода, а также применением завоевавшего признание пакета численного анализа напряжено-деформированного состояния.

## Литература

1. Кузнецов Н. Д., Цейтлин В. И. Эквивалентные испытания газотурбинных двигателей. – М. : Машиностроение, 1976. – 216 с.
2. Механические свойства сталей и сплавов при нестационарном нагружении : справочник. / Д. А. Гохфельд, Л. Б. Гецов, К. М. Кононов, Е. Т. Кульчихин, Ю. Н. Ребяков, О. С. Садаков, С. А. Тимашев, В. Н. Чепурский. – Екатеринбург : УрО РАН, 1996. – 408 с.
3. Experimental study on the influence of bending and straightening cycles for non-destructive and destructive coiled tubing / Y. Qian-Bei, S. Guohao, W. Gang, L. Jubao, Y. Ming, Z. Qiang // Engineering Failure Analysis. – 2021. – No. 123. – P. 105218. – DOI: 10.1016/j.engfailanal.2021.105218.
4. Порошин В. Б., Буксбаум В. Б., Дружинин П. С. Методика прогнозирования долговечности колонны гибких труб на основе результатов лабораторных и стендовых испытаний // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6 (3). – С. 72–77.
5. Ильиных В. Н., Сызранцев В. Н. Построение математической модели для описания данных малоцикловых усталостных испытаний // Фундаментальная наука и технологии – перспективные разработки : материалы международной научно-практической конференции, Москва, 22–23 мая, 2013. – С. 224–226.
6. Порошин В. Б., Уфимцев А. Н. Цифровая модель испытательного стенда и МКЭ-анализ кинетики напряженно-деформированного состояния образцов колтюбинговых труб // Сборник научных статей Всероссийской научной конференции с международным участием, ЦИСП'2023 «Цифровая индустрия: состояние и перспективы развития–2023», Челябинск, 21–23 ноября 2023 г. – Челябинск : Издательский центр ЮУрГУ, 2024. – С. 377–386. – URL: <http://omega.sp.susu.ru/glosic2023/articles/039.pdf>
7. [http://help/ans\\_elem/Hlp\\_E\\_SHELL181.html](http://help/ans_elem/Hlp_E_SHELL181.html)
8. Ramberg W., Osgood W.R. Description of stress–strain curves by three parameters. – NASA–TN–902, 1943. – 32 p.