

О. О. Водка<sup>1</sup>, М. І. Шаповалова<sup>2</sup>, В. В. Жихарев<sup>3</sup><sup>1</sup>НТУ «ХПІ», м. Харків, Україна, oleksii.vodka@khpі.edu.ua;

ORCID iD: 0000-0002-4462-9869

<sup>2</sup>НТУ «ХПІ», м. Харків, Україна, Mariia.Shapovalova@khpі.edu.ua; ORCID iD: 0000-0002-4771-7485<sup>3</sup>НТУ «ХПІ», м. Харків, Україна, Vladyslav.Zhykhariev@infiz.khpі.edu.ua; ORCID iD: 0009-0006-0640-5895

## СТВОРЕННЯ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ ТА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ЙМОВІРНІСНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЧИСТОГО МАГНІЮ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ КЛІТИННИХ АВТОМАТІВ

У статті розглянуто комплексний підхід дослідження механічної поведінки полікристалічного магнію. Запропоновано методологію дослідження впливу стохастичної природи мікроструктури магнію, зумовленої особливостями його гексагональної щільноупакованої (НСП) кристалічної ґратки, на варіативність макроскопічних пружних властивостей. Метою роботи було визначення ефективних пружних характеристик полікристалічного магнію шляхом аналізу стохастично згенерованих мікроструктур та проведення серії комплексних чисельних експериментів методом скінченних елементів. В дослідженнях метод клітинних автоматів було використано для генерації 100 незалежних тривимірних моделей репрезентативних об'ємів (RVE) зернової структури. Ці моделі відрізнялися випадковим розподілом центрів кристалізації та топологією зернових меж, забезпечуючи репрезентативну вибірку мікроструктурних реалізацій. Для кожної згенерованої моделі проведено серію чисельних експериментів за допомогою методу скінченних елементів (МСЕ). Граничні умови було реалізовано шляхом завдання поля переміщень, що відповідало набору унікальних сценаріїв деформаційного навантаження. Це дозволило обчислити напружено-деформований стан для кожного (RVE). У результаті дослідження визначено ефективні пружні характеристики чистого магнію та проведено їх статистичний аналіз. Встановлено, що розподіл модулів Юнга та зсуву підпорядковується нормальному закону з високим ступенем симетрії. Аналіз отриманих даних продемонстрував, що, незважаючи на виражену локальну анізотропію окремих кристалітів, полікристалічний магній демонструє квазіізотропну поведінку зі стабільними усередненими характеристиками. Низькі стандартні відхилення параметрів свідчать про високу статистичну стабільність моделі. Результати підтверджують ефективність запропонованого підходу. Такий метод дозволяє точно відтворити реальні пружні характеристики матеріалу з мінімальною похибкою відносно довідкових даних, без необхідності проведення дорогих лабораторних випробувань.

ПОЛІКРИСТАЛІЧНИЙ МАГНІЙ, ПРУЖНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, КЛІТИННІ АВТОМАТИ, МІКРОСТРУКТУРА, ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, СТОХАСТИЧНИЙ АНАЛІЗ.

**O. O. Vodka, M. I. Shapovalova, V. V. Zhykhariev. Development of a mathematical model and software for determining the probabilistic characteristics of pure magnesium using cellular automata.** The article reviews a comprehensive approach to studying the mechanical behavior of polycrystalline magnesium. A methodology is proposed for studying the influence of the stochastic nature of the magnesium microstructure, conditioned by the peculiarities of its hexagonal close-packed (HCP) crystal lattice, on the variability of macroscopic elastic properties. The aim of the work was to determine the effective elastic characteristics of polycrystalline magnesium by analyzing stochastically generated microstructures and conducting a series of complex numerical experiments using the finite element method. In the studies, the cellular automata method was used to generate 100 independent three-dimensional models of Representative Volume Elements (RVEs) of the grain structure. These models differed in the random distribution of crystallization centers and the topology of grain boundaries, providing a representative sample of microstructural realizations. A series of numerical experiments was conducted for each generated model using the finite element method (FEM). The boundary conditions were realized by prescribing a displacement field corresponding to a set of unique strain loading scenarios. This allowed for the computation of the stress-strain state for each RVE. As a result of the study, the effective elastic characteristics of pure magnesium were determined, and their statistical analysis was performed. It was established that the distributions of Young's and shear moduli follow a normal law with a high degree of symmetry. Analysis of the obtained data demonstrated that, despite the pronounced local anisotropy of individual crystallites, polycrystalline magnesium exhibits quasi-isotropic behavior with stable averaged characteristics. Low standard deviations of the parameters indicate high statistical stability of the model. The results confirm the effectiveness of the proposed approach. This method allows for the accurate reproduction of the material's actual elastic characteristics with minimal error relative to reference data, eliminating the need for expensive laboratory testing.

POLYCRYSTALLINE MAGNESIUM, ELASTIC PROPERTIES, CELLULAR AUTOMATA, MICROSTRUCTURE, NUMERICAL MODELLING, STOCHASTIC ANALYSIS

### Вступ

Завдяки низькій густині та сприятливим механічним параметрам, чистий магній Mg розглядається як перспективний матеріал для інженерних застосувань. Із густиною  $\sim 1.74$  г/см<sup>3</sup> він значно легший за традиційні

конструкційні метали, зокрема алюміній і сталь, що обумовлює зростаючий інтерес до нього у контексті зниження ваги технічних систем. Це сприяє його широкому застосуванню в автомобілебудуванні [1], авіації [2], портативній електроніці [3] та біомедичних технологіях [4].

Особливістю магнію є його структура. Сама вона визначає його механічну поведінку. Магній має гексагональну щільноупаковану (НСР) кристалічну структуру, що обмежує кількість доступних систем ковзання при кімнатній температурі, тим самим знижуючи пластичність матеріалу [5]. НСР-структура спричиняє високу анізотропію, асиметрію текучості та залежність механічних властивостей від орієнтації кристалів [9], [10]. Ця особливість зумовлює необхідність застосування спеціальних методів обробки, серед яких асиметричне прокатування, попередня деформація та легування, з метою покращення деформаційних властивостей магнієвих сплавів [7]. Саме ця особливість робить його цікавим для досліджень його механічних властивостей та граничного стану.

Магній та його сплави мають широкий спектр застосувань. У автомобілебудуванні магнієві сплави використовуються для виготовлення елементів кузова, шасі, рульових колонок та сидінь завдяки їх легкості та гарній литності [1]. У біомедицині Mg-сплави розглядаються як потенційно біосумісні та біодеградуючі матеріали для імплантів [4], [11]. Проте обмежена корозійна стійкість і механічна стабільність стримують їх масове впровадження [4].

Іншим активним напрямом є дослідження способів покращення механічних властивостей магнію. Основні методи включають легування елементами, такими як Gd, Y, Ce [10], [12], [13]; термомеханічну обробку [13], [14]; а також комп'ютерне моделювання [15], [16], [17]. Ці підходи дозволяють впливати на мікроструктуру матеріалу, зокрема розмір зерен, текстуру, кількість двійників та характер фазових включень, що безпосередньо впливає на пластичність, міцність і стійкість до руйнування [7], [8], [18].

Мікроструктура магнію, включаючи розподіл зерен, орієнтацію кристалів і наявність фазових включень, є ключовим фактором, що визначає його механічні характеристики. Методи, що використовуються для дослідження мікроструктури, включають оптичну та електронну мікроскопію (SEM, TEM), електронну дифракцію зворотного розсіювання (EBSD), а також дифракцію рентгенівських променів [13], [18], [19]. Кожен із цих методів має свої переваги: TEM дозволяє аналізувати наномасштабні дефекти та механізми деформації, EBSD – визначити текстуру та орієнтацію зерен, а SEM – досліджувати морфологію поверхні.

Дослідження механічних властивостей магнію здійснюється шляхом статичних та динамічних випробувань на розтяг, стиск, згин, а також за допомогою методів наноіндентації та випробувань при високих швидкостях деформації [18], [20]. Аналіз поведінки матеріалу в умовах ударного навантаження дозволяє передбачити його реакцію в умовах експлуатації, як-от аварійні ситуації в автомобілях або динамічні навантаження в авіації.

Сучасні підходи до прогнозування властивостей магнію включають машинне навчання [11], [17], що дозволяє моделювати зв'язок між хімічним складом, мікроструктурою і механічними властивостями матеріалу. Ці методи значно скорочують цикл розробки нових матеріалів і дозволяють здійснювати інверсне проектування Mg-сплавів з заданими характеристиками.

Деякі джерела не враховують повною мірою реальні умови експлуатації, вплив багатоконпонентних систем на фазову стабільність або мають обмежену статистичну вибірку [7], [12]. Це створює потребу у подальшому дослідженні ймовірнісних характеристик чистого магнію – статистичної варіації властивостей в залежності від мікроструктурних неоднорідностей та умов обробки.

З огляду на широке застосування магнію в промисловості, його складну кристалічну будову та труднощі у прогнозуванні механічної поведінки, вивчення ймовірнісних характеристик цього матеріалу набуває особливої актуальності. Розуміння статистичних залежностей механічних властивостей чистого магнію, з урахуванням мікроструктурних особливостей і умов обробки, є не лише важливим науковим завданням, а й відкриває широкі перспективи для подальших досліджень та оптимізації матеріалів із заданими властивостями. Саме тому метою цієї роботи є встановлення ймовірнісних закономірностей механічної поведінки магнію з використанням сучасних підходів до аналізу мікроструктури.

## 1. Мета роботи

Основна задача роботи полягає у встановленні ефективних пружних характеристик полікристалічного магнію на основі аналізу стохастично згенерованих мікроструктур та проведенні чисельних експериментів методом скінченних елементів.

Спрямованість роботи зосереджена на дослідженні впливу випадкової мікроструктурної неоднорідності на варіативність модулів пружності, коефіцієнтів Пуассона та зсувних модулів, а також на отриманні їх надійних ймовірнісних оцінок для репрезентативного об'єму магнію.

## 2. Постановка задачі

Для досягнення мети планується виконати ряд наступних задач:

- 1) Генерація мікроструктури репрезентативного об'єму полікристалічного магнію шляхом застосування методу клітинних автоматів;
- 2) Обчислення напружено-деформованого стану для різних схем навантаження;
- 3) Гомогенізація напружено-деформованого стану;
- 4) Визначення еквівалентних пружних констант;
- 5) Статистична обробка отриманих результатів.

### 3. Побудова математичної моделі

#### 3.1. Обчислення НДС

Для моделювання напружено-деформованого стану (НДС) використовується метод скінченних елементів (МСЕ). Основна ідея полягає в апроксимації поля переміщень у межах твердого тіла. Гіпотезою МСЕ є те, що поле переміщень  $u(x)$  всередині кожного елемента можна апроксимувати лінійною комбінацією вузлових значень за допомогою функцій форми:

$$u(x) = N(x) \cdot d, \quad (1)$$

де  $u(x)$  – вектор переміщень у точці  $x$ ,  $N(x)$  – матриця функцій форми (інтерполяційних функцій),  $d$  – вектор вузлових переміщень.

У роботі для просторової дискретизації використовувався тривимірний ізопараметричний скінченний елемент SOLID185, що реалізований у програмному комплексі ANSYS Mechanical. Він має 8 вузлів, кожен з трьох ступенями свободи ( $u, v, w$ ).

Поле деформацій  $\varepsilon$  визначається як градієнт переміщень у наступній формі:

$$\varepsilon = B \cdot d, \quad (2)$$

де  $\varepsilon$  – вектор деформацій,  $B$  – матриця похідних функцій форми, що перетворює переміщення у деформації. Тоді матриця жорсткості елемента визначається як:

$$K_e = \int_V B^T \cdot C \cdot B dV, \quad (3)$$

де  $B^T$  – транспонована матриця похідних функцій форми,  $C$  – матриця пружних констант.

Пружні властивості магнію, як матеріалу з гексагонально щільноупакованою (НСР) кристалічною ґраткою, описуються тензором пружності четвертого рангу  $C_{ijkl}$ , який встановлює лінійний зв'язок між тензорами напружень та деформацій відповідно до узагальненого закону Гука:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (4)$$

де  $C_{ijkl}$  – тензор пружних констант четвертого рангу.

Для обчислень тензор  $C_{ijkl}$  подається у вигляді симетричної матриці розмірності  $6 \times 6$ :

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & \dots & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & \dots & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & \dots & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & \dots & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & \dots & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & \dots & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Для матеріалів з гексагональною щільноупакованою кристалічною решіткою пружна поведінка є анізотропною, і для її опису використовується п'ять незалежних коефіцієнтів:

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (6)$$

Фізична симетрія (*hcr*) ґратки магнію накладає додаткові обмеження на ці константи. Зокрема, співвідношення між компонентами  $C_{66} = 1/2 (C_{11} - C_{12})$  є прямим наслідком симетрії кристала відносно осі обертання шостого порядку головної кристалографічної осі  $Z$ .

В табл. 1 наведено значення констант жорсткості для чистого магнію при кімнатній температурі.

Таблиця 1

Пружні константи жорсткості чистого монокристалічного магнію  $C_{ij}$

Показник	Значення, ГПа
$C_{11}$	59.7
$C_{33}$	61.7
$C_{44}$	16.4
$C_{12}$	26.2
$C_{13}$	21.7
$C_{66}$	16.75

Для обчислення середніх значень деформацій і напружень використовуються методи гомогенізації. Тоді середня деформація визначається згідно (7), а середнє напруження (8):

$$\langle \varepsilon_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij}(x, y, z) dV, \quad (7)$$

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij}(x, y, z) dV, \quad (8)$$

де  $\varepsilon_{ij}, \sigma_{ij}$  – компоненти тензора напружень та деформацій,  $\langle \dots \rangle$  – середні значення.

#### 3.2. Визначення еквівалентних пружних констант

Для визначення пружних властивостей матеріалу на основі отриманих даних (експериментальних або розрахункових) необхідно трансформувати визначальне рівняння. Традиційний запис  $\sigma = C\varepsilon$  не дозволяє явно виділити модулі пружності як вектор невідомих. Враховуючи симетрію матриці жорсткості, існує максимум 21 незалежна компонента. Сформуємо вектор шуканих параметрів  $C_{vec}$  розмірність якого  $21 \times 1$ :

$$C_{vec} = [C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{14}, C_{15}, C_{16}, C_{22}, \dots, C_{66}]^T \quad (9)$$

Це дозволяє переписати закон Гука у вигляді системи лінійних рівнянь відносно компонент пружності:

$$\sigma = A(\varepsilon) C_{vec}, \quad (10)$$

де  $A(\varepsilon)$  – структурна матриця деформацій розмірністю  $6 \times 21$ , зображено на рис. 1.

Ця матриця конструюється таким чином, щоб врахувати внесок кожної компоненти деформації у відповідне напруження згідно з симетрією тензора.

$$A(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{zz} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{xz} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{zz} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{xz} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{yy} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{zz} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{xz} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{yy} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{zz} & 0 & 0 & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yz} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{yy} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{zz} & 0 & 0 & \varepsilon_{xy} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{xx} & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{yy} & 0 & 0 & 0 & \varepsilon_{zz} & 0 & 0 & \dots & \varepsilon_{xz} \end{pmatrix}$$

Рис. 1. Структурна матриця деформацій розмірністю 6×21

Таке представлення є критично важливим, оскільки зводить задачу ідентифікації матеріалу до системи лінійних алгебраїчних рівнянь виду  $Ax = b$ . Оскільки одне деформаційне навантаження формує лише шість рівнянь, тоді як кількість невідомих компонент тензора жорсткості становить 21, така система є невизначеною й не має єдиного розв'язку. Тому необхідно розглядати множину незалежних навантажень, що утворюють розширену систему рівнянь, для якої компоненти тензора пружності можуть бути відновлені шляхом застосування методу найменших квадратів.

### 3.3. Моделювання мікроструктури

Для моделювання мікроструктури полікристалічного магнію застосовано метод клітинних автоматів (КА). Простір розбито на тривимірну решітку  $L$ , що складається з клітин із дискретними станами  $S_i$ , які відповідають окремим зернам або фазам матеріалу:

$$S_i = \{1, 2, 3, \dots, n_g\}, \quad (11)$$

де  $S_i = 0$  – рідка або некристалізована фаза, а  $S_i > 0$  – номер зерна.

Початковий розподіл станів визначався випадково з урахуванням концентрації зародків  $\Psi$ , що задає частку клітин, які ініціюють кристалізацію:

$$N_0 = \Psi N_{total}, \quad (12)$$

де  $N_{total}$  – кількість клітин у розрахунковій області.

Взаємодія між клітинами здійснюється за правилом околу фон Неймана ( $N_i$ ), який охоплює шість сусідів у трьох напрямках ( $\pm x, \pm y, \pm z$ ). На кожному часовому кроці виконується оновлення станів:

$$S_i^{(t+1)} = f(S_i^{(t)}, \{S_j^{(t)} | j \in N_i\}), \quad (13)$$

де  $f$  – функція переходу, що визначає зміну стану клітини на основі поточного стану та станів сусідів.

На рис. 2 наведено тривимірну модель розподілу зерен у полікристалічному магнії, побудовану методом клітинних автоматів. Кожен воксель відповідає елементарному об'єму (клітині). Різні кольори позначають різні зерна. Для генерації використано MatMiz3D [23].

Модель побудована в кубічному об'ємі з періодичними граничними умовами. Початковий стан формується шляхом випадкової ініціалізації зерен у репрезентативному об'ємі розміром 25 вокселів із початковою концентрацією зародків 20%. Ітераційне зростання клітин забезпечує поступове заповнення простору та формування статистично рівноважної зернової структури.

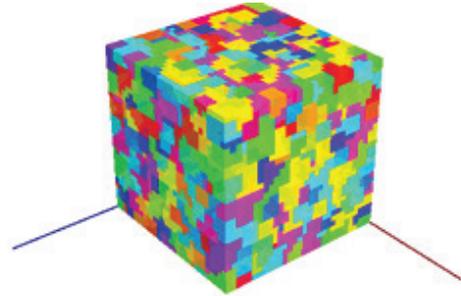


Рис. 2. Просторова модель розподілу зерен у кристалічному магнії, побудованому методом КА

### 4. Граничні умови

Для визначення ефективних пружних характеристик полікристалічного магнію проведено серію чисельних експериментів на основі мікроструктур, згенерованих методом клітинних автоматів.

З урахуванням стохастичної природи мікроструктури сформовано 100 незалежних моделей мікроструктури ( $M_1, M_2, \dots, M_{100}$ ), що відрізнялися випадковим розподілом центрів кристалізації та топологією зернових меж.

Для кожної згенерованої мікроструктури визначався НДС для набору навантажень, після чого для всього представницького об'єму обчислювали середні значення компонент тензора деформацій  $\langle \varepsilon \rangle$  та тензора напружень  $\langle \sigma \rangle$ .

Для прикладання навантаження до репрезентативного об'єму RVE задаються значення тензора малих деформацій  $\varepsilon_{ij} = const$ .

Однак SE-комплекси не дозволяють напряму задавати тензор деформацій на границі репрезентативного об'єму. Тому необхідно перейти від деформацій до відповідного поля переміщень, яке забезпечує рівномірний стан деформацій у всьому RVE.

Зв'язок між переміщенням та деформаціями задається рівнянням:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{du_i}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_i} \right), \quad (14)$$

Для тензора деформацій інтегрування цих рівнянь приводить до аналітичного поля переміщень:

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= \varepsilon_{xx}x + \varepsilon_{xy}y + \varepsilon_{xz}z \\ v(x, y, z) &= \varepsilon_{yy}y + \varepsilon_{xy}x + \varepsilon_{yz}z, \\ w(x, y, z) &= \varepsilon_{yy}y + \varepsilon_{xy}x + \varepsilon_{yz}z \end{aligned} \quad (15)$$

Це поле використовується як гранична умова, що забезпечує однорідний стан деформацій у представницькому об’ємі та дозволяє обчислити середні напруження для подальшого визначення ефективного тензора жорсткості

Для забезпечення повного охоплення всіх можливих комбінацій станів напружено деформованого стану використовувалася дискретна сітка з 64 унікальних сценаріїв навантаження ( $2^6$  комбінацій):

$$\varepsilon^{(k)} = [\pm\varepsilon_{xx}, \pm\varepsilon_{yy}, \pm\varepsilon_{zz}, \pm\varepsilon_{xy}, \pm\varepsilon_{xz}, \pm\varepsilon_{yz}], \quad (16)$$

де  $k = 1, 2, \dots, 64$ .

Для кожної з 100 мікроструктур проведено 64 розрахунки, що сформувало датасет із 6400 чисельних експериментів. Кожен елемент цього датасету містить пари  $(\varepsilon^{(k)}, \sigma^{(k)})$ , на основі яких здійснюється відновлення ефективного тензора жорсткості  $C_{eff}$ .

Кожен компонент  $C_{ij}^{eff}$  оцінювався через регресійне співвідношення між відповідними компонентами середніх напружень і деформацій для 64 різних сценаріїв. Надалі для кожної з 100 стохастичних реалізацій  $C_{eff}^{(m)}$  обчислювалися середні значення, дисперсії та довірчі інтервали.

$$C_{ij} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M C_{ij}^{(m)}$$

$$\sigma_{C_{ij}} = \sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{m=1}^M (C_{ij}^{(m)} - C_{ij})^2}, \quad (17)$$

де  $M$  – це кількість реалізацій.

Для статистичної оцінки отриманих результатів проведено аналіз ймовірнісних розподілів пружних констант, зокрема:

- гістограми розподілу  $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}$
- оцінку коефіцієнта варіації
- побудову довірчих інтервалів для кожної компоненти.

Таке представлення дало змогу кількісно охарактеризувати вплив стохастичних мікроструктурних факторів на пружні властивості полікристалічного магнію.

Після проведення чисельних експериментів методом скінченних елементів отримано просторовий розподіл еквівалентних напружень за критерієм Мізеса, що формується в межах репрезентативного об’єму досліджуваного зразка магнію.

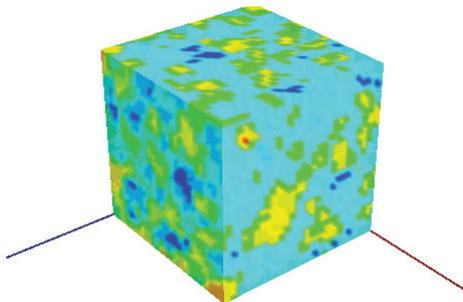


Рис. 3. Розподіл еквівалентних напружень за критерієм Мізеса в репрезентативному об’ємі моделі магнію

Отримана кольорова карта відображає характер перерозподілу напружень у матеріалі під дією прикладеного деформаційного навантаження та дозволяє оцінити локальні відхилення.

На рис. 3 наведено приклад тривимірного поля еквівалентних напружень Мізеса, отриманого для однієї з реалізацій стохастично згенерованої мікроструктури.

## 5. Аналіз результатів

Найбільші напруження зосереджуються поблизу меж зерен та в місцях зі зміненою орієнтацією кристалів.

У ході аналізу 100 стохастично згенерованих мікроструктур, побудованих методом клітинних автоматів, для кожної реалізації було визначено відповідну матрицю жорсткості. Отримані матриці  $C_{eff}^{(k)}$  були усереднені для формування матриці пружних характеристик матеріалу, після чого проведено їх нормування та статистичний аналіз компонент.

На основі усереднених тензорів жорсткості  $C_{eff}$  визначено шість незалежних діагональних компонент, що відповідають основним пружним властивостям матеріалу – трьом модулям Юнга ( $E_{xx}, E_{yy}, E_{zz}$ ) та трьом зсувним модулям ( $G_{xy}, G_{yz}, G_{xz}$ ).

Розподіли цих величин мають близьку до нормальної форму рис. 4.

У табл. 2 представлено кількісні статистичні показники, отримані на основі аналізу ефективних пружних властивостей магнію.

Таблиця 2

Статистичні параметри основних пружних характеристик магнію

Показник	Мат. очікування	Середньо-квадратичне відхилення	Коефіцієнт варіації
	$\langle X \rangle$ , ГПа	$\sqrt{\text{var}(X_{ij})}$ , ГПа	$\frac{\sqrt{\text{var}(X_{ij})}}{\bar{X}}$
$E_{xx}$	47.200	0.171	0.0036
$E_{yy}$	47.211	0.213	0.0045
$E_{zz}$	46.985	0.136	0.0029
$G_{xy}$	20.656	0.116	0.0056
$G_{yz}$	18.536	0.087	0.0047
$G_{xz}$	18.550	0.090	0.0049

Середні значення відповідних модулів практично збігаються, що свідчить про ізотропність поведінки матеріалу. Середньоквадратичні відхилення для модулів Юнга не перевищують 0.21 ГПа, а для модулів зсуву – 0.12 ГПа. Отримані результати демонструють, що середні значення модулів Юнга лежать у вузькому інтервалі 46.9–47.2 ГПа, тоді як зсувні модулі – у межах 18.5–20.7 ГПа. Коефіцієнти варіації не перевищують 0.006.

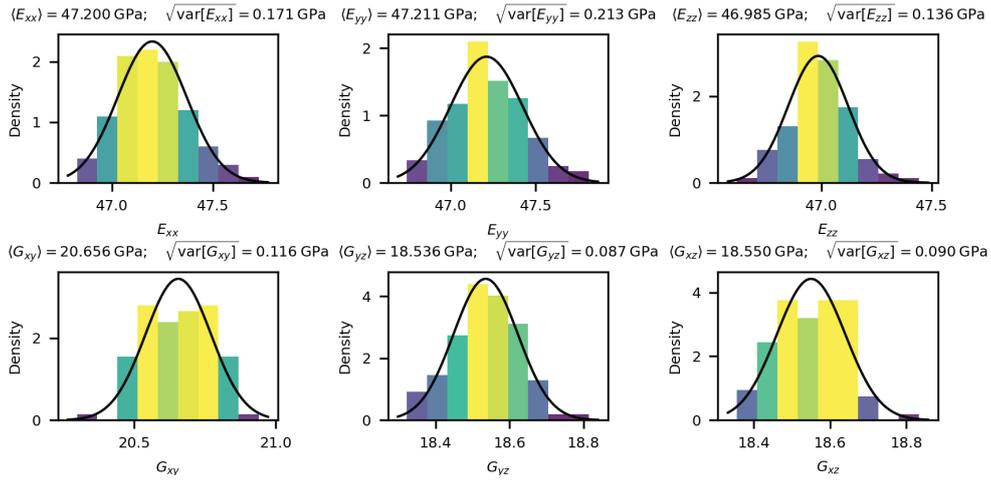


Рис. 4. Розподіл імовірності основних пружних характеристик модулів Юнга  $E_{xx}$ ,  $E_{yy}$ ,  $E_{zz}$  та зсувних модулів  $G_{xy}$ ,  $G_{yz}$ ,  $G_{xz}$

Інверсія матриці жорсткості  $C_{eff}$  дозволяє отримати матрицю податливості  $S_{eff} = C_{eff}^{-1}$ , елементи якої описують реакцію матеріалу у вигляді деформацій при дії напружень.

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{E_{xx}} & \frac{\nu_{xy}}{E_{xx}} & \frac{\nu_{xz}}{E_{xx}} & \frac{\nu_{yz,xx}}{G_{yz}} & \frac{\nu_{xz,xx}}{G_{xz}} & \frac{\nu_{xy,xx}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{yx}}{E_{xx}} & \frac{1}{E_{yy}} & \frac{\nu_{yz}}{E_{yy}} & \frac{\nu_{yz,yy}}{G_{yz}} & \frac{\nu_{xz,yy}}{G_{xz}} & \frac{\nu_{xy,yy}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{zx}}{E_{xx}} & \frac{\nu_{zy}}{E_{yy}} & \frac{1}{E_{zz}} & \frac{\nu_{yz,zz}}{G_{yz}} & \frac{\nu_{xz,zz}}{G_{xz}} & \frac{\nu_{xy,zz}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{xx,yz}}{E_{xx}} & \frac{\nu_{yy,yz}}{E_{yy}} & \frac{\nu_{zz,yz}}{E_{zz}} & \frac{1}{G_{yz}} & \frac{\nu_{yz,xx}}{G_{xz}} & \frac{\nu_{yz,xy}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{xx,xz}}{E_{xx}} & \frac{\nu_{yy,xz}}{E_{yy}} & \frac{\nu_{zz,xz}}{E_{zz}} & \frac{\nu_{zx,yz}}{G_{yz}} & \frac{1}{G_{xz}} & \frac{\nu_{xz,xy}}{G_{xy}} \\ \frac{\nu_{xx,xy}}{E_{xx}} & \frac{\nu_{yy,xy}}{E_{yy}} & \frac{\nu_{zz,xy}}{E_{zz}} & \frac{\nu_{xy,yz}}{G_{yz}} & \frac{\nu_{xy,xz}}{G_{xz}} & \frac{1}{G_{xy}} \end{pmatrix} \quad (18)$$

На її основі визначено коефіцієнти Пуассона  $\nu_{ij}$ , що характеризують взаємозв'язок між поздовжніми та поперечними деформаціями в різних напрямках.

Саме застосування цих формул до кожної стохастичної мікроструктури дозволило отримати вибірки значень  $\nu_{xy}$ ,  $\nu_{xz}$ ,  $\nu_{yz}$ , а також низку додаткових зсувних компонент, на основі яких побудовано гістограми розподілу рис. 5 та визначено статистичні параметри, подані в табл. 3.

Гістограми розподілу цих коефіцієнтів демонструють вузькі й симетричні профілі, де чорна лінія – апроксимація нормальним розподілом; над гістограмами вказані середні значення  $\langle \nu_{ij} \rangle$ . Над кожним графіком подано оцінки математичного очікування  $\langle \nu_{ij} \rangle$  та середньоквадратичного відхилення  $\sqrt{\text{var}(\nu_{ij})}$ , що дозволяє кількісно оцінити ступінь варіативності відповідних параметрів.

Отримані значення основних коефіцієнтів Пуассона узгоджуються з очікуваною деформаційною поведінкою гексагональної ґратки магнію: де коефіцієнти

Пуассона мають значення  $\nu_{xy} \approx 0.14$ , а навантаження уздовж осі симетрії має  $\nu_{xz} \approx \nu_{yz} \approx 0.22$ . Розподіл цих параметрів містить дуже малі середньоквадратичні відхилення  $\sqrt{\text{var}(\nu_{ij})} < 0.006$ , що підтверджує високу стабільність чисельної моделі. Відносні середньоквадратичні відхилення в межах 2,2% для всіх трьох основних компонент свідчать про чітку статистичну відтворюваність і сталість поперечних деформацій у відповідних напрямках.

Таблиця 3

Статистичні параметри коефіцієнтів Пуассона

Показник	Мат. очікування	Середньоквадратичне відхилення	Коефіцієнт варіації
	$\langle \nu_{ij} \rangle$	$\sqrt{\text{var}(\nu_{ij})}$	$\frac{\sqrt{\text{var}(\nu_{ij})}}{\langle \nu_{ij} \rangle}$
$\nu_{xy}$	0.139	0.003	0.0216
$\nu_{xz}$	0.220	0.005	0.0227
$\nu_{yz}$	0.221	0.005	0.0226
інші $\nu_{ij}$	$\approx 0.000$	0.003–0.009	0

Окрему увагу слід звернути на змішані компоненти  $\nu_{ij}$ , для яких середні значення перебувають у межах  $\langle \nu_{ij} \rangle \approx 0$ , водночас їх середнє квадратичне відхилення становить 0.003–0.009. Це означає, що змішані компоненти не мають суттєвого вкладу у матрицю пружних констант. Таким чином, їх можна вважати статистичним шумом, який не впливає на загальну механічну відповідь.

На основі отриманих значень  $\nu_{ij}$  побудовано нормалізовану матрицю коефіцієнтів Пуассона рис. 6. Вона узагальнює структуру деформаційних зв'язків у полікристалічному магнії: три основні компоненти формують виразні міжосьові залежності, тоді як змішані елементи фактично дорівнюють нулю, що повністю відповідає теоретичній симетрії НСР-решітки та підтверджує коректність чисельної моделі.

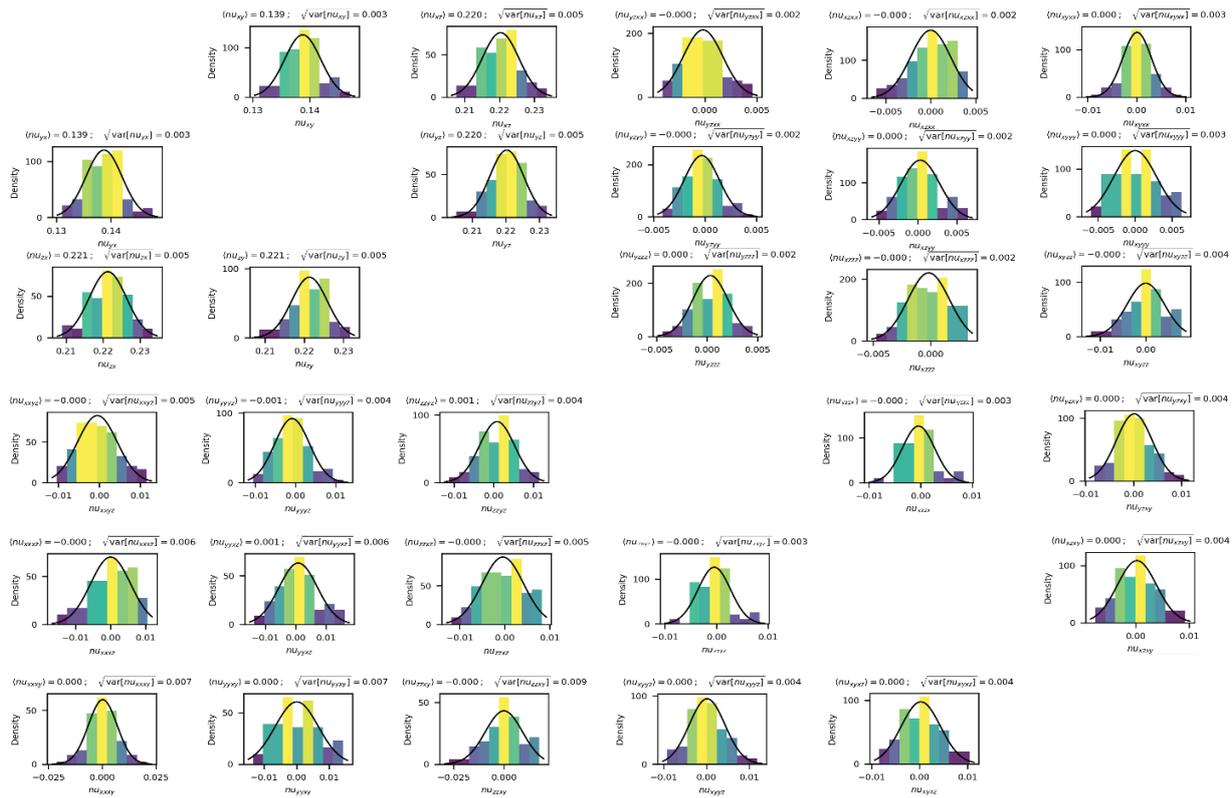


Рис. 5. Ймовірнісні розподіли коефіцієнтів Пуассона  $\nu_{xy}$ ,  $\nu_{xz}$ ,  $\nu_{yz}$  та допоміжних компонент податливості для стохастичних мікроструктур магнію

	XX	YY	ZZ	XY	YZ	XZ
XX	-1.000	0.139	0.220	0.000	-0.000	-0.000
YY	0.139	-1.000	0.220	0.000	-0.000	0.000
ZZ	0.221	0.221	-1.000	-0.000	0.000	-0.000
XY	0.000	0.000	-0.000	-1.000	0.000	0.000
YZ	-0.000	-0.001	0.001	0.000	-1.000	-0.000
XZ	-0.000	0.001	-0.000	0.000	-0.000	-1.000

Рис. 6. Нормалізована матриця коефіцієнтів Пуассона

**Висновки**

У роботі досліджено стохастичні та статистичні характеристики пружних властивостей чистого магнію на основі моделювання мікроструктури методом клітинних автоматів та подальшої гомогенізації механічної відповіді.

Побудована чисельна модель дозволила відтворити етапи формування зернової структури матеріалу, обчислити ефективні компоненти тензора жорсткості  $C_{eff}$  і податливості  $S_{eff}$ , а також визначити макроскопічні параметри – модулі Юнга, зсувні модулі та коефіцієнти Пуассона.

Аналіз нормалізованої матриці жорсткості показав, що для гексагонально щільноупакованої (НСР)

структури магнію головні діагональні елементи характеризуються стабільними значеннями, які визначають основну пружну реакцію матеріалу, а позадіагональні елементи в межах 0.13–0.22 відображають типові міжосеві зв'язки.

Відсутність значущих позанормальних компонент підтверджує осьову симетрію НСР-ґратки та правильність побудованої чисельної моделі.

Проведений статистичний аналіз ефективних модулів показав, що середні значення модулів Юнга становлять  $\langle E_{xx} \rangle = 47.2$ ,  $\langle E_{yy} \rangle = 47.2$ ,  $\langle E_{zz} \rangle = 47.0$  ГПа, а зсувних модулів –  $\langle G_{xy} \rangle = 20.7$ ,  $\langle G_{yz} \rangle = 18.5$ ,  $\langle G_{xz} \rangle = 18.6$  ГПа. Отримані результати добре узгоджуються з експериментальними і довідковими даними для чистого магнію: за літературними джерелами [23], значення становлять  $E = 44–48$  ГПа,  $G = 17–19$  ГПа,  $\nu = 0.17–0.25$ . Таким чином, похибка моделі не перевищує 5% від граничних показників, що підтверджує її достовірність.

**Таблиця 4**

Порівняння результатів власних розрахунків з даними літературних джерел

Показник	Результати експерименту (МСЕ), [ГПа/-]	Данні з літератури, [ГПа/-]
$E_{xx}$	47.2	44-48
$G_{xy}$	20.7	17-19
$\nu$	0.22	0.17-0.25

Розподіли компонент тензора пружності та коефіцієнтів Пуассона мають нормальний характер з малими стандартними відхиленнями, які не перевищують 0.01, що вказує на статистичну збіжність і стабільність чисельного методу. Середні значення коефіцієнтів Пуассона становлять:  $\langle v_{xy} \rangle = 0.139$ ,  $\langle v_{xz} \rangle = 0.220$ ,  $\langle v_{yz} \rangle = 0.221$ , що практично збігається з експериментально відомими величинами для НСР-магнію ( $\nu = 0.17\text{--}0.25$ ).

Загалом проведене дослідження показало, що метод клітинних автоматів у поєднанні з підходом стохастичної гомогенізації може бути ефективним інструментом для оцінки пружних характеристик магнію та матеріалів із подібною НСР-структурою.

Отримані результати підтверджують можливість відтворення реальних характеристик без залучення прямих експериментів і можуть бути використані для розроблення інтелектуальних моделей прогнозування пружної поведінки та пошкоджуваності магнієвих сплавів.

### Підтримка

Ця робота виконана за підтримки МОН України в рамках реалізації науково-дослідної роботи «Алгоритми, моделі та засоби штучного інтелекту для дворівневого моделювання поведінки складних матеріалів для техніки подвійного призначення» (№ ДР 0124U000450).

### Список літератури:

- [1] Liu B., Yang J., Zhang X., Yang Q., Zhang J., Li X. Development and application of magnesium alloy parts for automotive OEMs: A review / B. Liu, J. Yang, X. Zhang, Q. Yang, J. Zhang, X. Li // *Journal of Magnesium and Alloys*. – 2023. – Vol. 11, No. 1. – P. 15–47. – DOI: 10.1016/j.jma.2022.12.015.
- [2] Luo A. A., Shi R., Miao J., Avey T. Magnesium sheet alloy development for room temperature forming: A review / A. A. Luo, R. Shi, J. Miao, T. Avey // *JOM*. – 2021. – Vol. 73, No. 5. – P. 1403–1418. – DOI: 10.1007/s11837-021-04616-y.
- [3] Jayasathyakawin S., Ravichandran M., Baskar N., Chairman C. A., Balasundaram R. Mechanical properties and applications of magnesium alloy: Review / S. Jayasathyakawin, M. Ravichandran, N. Baskar, C. A. Chairman, R. Balasundaram // *Materials Today: Proceedings*. – 2020. – Vol. 27. – P. 909–913. – DOI: 10.1016/j.matpr.2020.01.255.
- [4] Tong X. et al. Enhanced mechanical properties, corrosion resistance, cytocompatibility, osteogenesis, and antibacterial performance of biodegradable Mg–2Zn–0.5Ca–0.5Sr/Zr alloys for bone-implant application / X. Tong et al. // *Advanced Healthcare Materials*. – 2024. – Vol. 13, No. 12. – P. 2303975. – DOI: 10.1002/adhm.202303975.
- [5] Pei Z. Connecting the mechanical properties of magnesium and high-entropy alloys / Z. Pei // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2023. – Vol. 966. – P. 171462. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.171462.
- [6] Alaneme K. K., Okotete E. A. Enhancing plastic deformability of Mg and its alloys—A review of traditional and nascent developments / K. K. Alaneme, E. A. Okotete // *Journal of Magnesium and Alloys*. – 2017. – Vol. 5, No. 4. – P. 460–475. – DOI: 10.1016/j.jma.2017.11.001.
- [7] Jonsson J. C., Chapman D. J., Farbaniec L., Escauriza E. M., Smith L. C., Eakins D. E. Role of crystal orientation in the dynamic strength of magnesium alloy AZ31B / J. C. Jonsson et al. // *JOM*. – 2024. – Vol. 76, No. 3. – P. 1628–1638. – DOI: 10.1007/s11837-023-05967-4.
- [8] Mao B., Zhang X., Menezes P. L., Liao Y. Anisotropic microstructure evolution of an AZ31B magnesium alloy subjected to dry sliding and its effects on friction and wear performance / B. Mao, X. Zhang, P. L. Menezes, Y. Liao // *Materialia*. – 2019. – Vol. 8. – P. 100444. – DOI: 10.1016/j.mtla.2019.100444.
- [9] Sisodia S., Jananandhan S., Pakki V. K., Konkati C., Chauhan A. Towards reducing tension–compression yield and cyclic asymmetry in pure magnesium and magnesium–aluminum alloy with cerium addition / S. Sisodia et al. // *Materials Science and Engineering A*. – 2023. – Vol. 886. – P. 145672. – DOI: 10.1016/j.msea.2023.145672.
- [10] Valipoorsalimi P., Sari Y. A., Pekguleryuz M. Mechanical Property Design of Bio-compatible Mg alloys using Machine-Learning Algorithms / P. Valipoorsalimi, Y. A. Sari, M. Pekguleryuz // arXiv preprint. – 2023. – URL: <https://arxiv.org/pdf/2305.12060> (accessed 26.05.2025).
- [11] Pang H. et al. Plasticity Improvement of Mg Alloys with Alloying Atoms (Gd, Y) / H. Pang et al. // *physica status solidi (b)*. – 2022. – Vol. 259, No. 11. – P. 2200209. – DOI: 10.1002/pssb.202200209.
- [12] Tan Y., Li W., Li A., Shi X. Microstructure and properties evolution of Mg–2Y–0.6Nd–0.6Zr alloy rolled at room and liquid nitrogen temperature / Y. Tan, W. Li, A. Li, X. Shi // *Scientific Reports*. – 2021. – Vol. 11. – P. 1–10. – DOI: 10.1038/s41598-021-99706-x.
- [13] Kalateh M. A., Talebi N., Nekoei S., Novini M. M., Khodabakhshi F., Nili-Ahmadabadi M. Thermo-mechanical processing of pure magnesium: Hot extrusion, hot rolling and cold drawing / M. A. Kalateh et al. // arXiv preprint. – 2025. – URL: (accessed 26.05.2025).
- [14] Wolf A. et al. Modeling metal forming of a magnesium alloy using an adapted material model / A. Wolf et al. // *Engineering Reports*. – 2022. – Vol. 4, No. 7–8. – P. e12540. – DOI: 10.1002/eng2.12540.
- [15] Tian B. H., Wu M. W., Zhang A., Guo Z. P., Xiong S. M. Phase-field modeling of dendritic growth of magnesium alloys with a parallel-adaptive mesh refinement algorithm / B. H. Tian et al. // *China Foundry*. – 2021. – Vol. 18, No. 6. – P. 541–549. – DOI: 10.1007/s41230-021-1116-5.
- [16] Poul M., Huber L., Bitzek E., Neugebauer J. Systematic Atomic Structure Datasets for Machine Learning Potentials: Application to Defects in Magnesium / M. Poul et al. // *Physical Review B*. – 2022. – Vol. 107, No. 10. – DOI: 10.1103/PhysRevB.107.104103.
- [17] Yu Q. Size-related Mechanical Properties of Pure Magnesium / Q. Yu. – 2012.
- [18] Bayat Tork N., Saghafian H., Razavi S. H., Al-Fadhlah K. J., Ebrahimi R., Mahmudi R. Microstructure and texture characterization of Mg–Al and Mg–Gd binary alloys processed by simple shear extrusion / N. Bayat Tork et al. // *Journal of Materials Research and Technology*. – 2019. – Vol. 8, No. 1. – P. 1288–1299. – DOI: 10.1016/j.jmrt.2018.06.023.
- [19] Singh A., Saal J. E. Dynamic properties of magnesium alloys / A. Singh, J. E. Saal // *JOM*. – 2014. – Vol. 66, No. 2. – P. 275–276. – DOI: 10.1007/s11837-013-0844-4.
- [20] Jiang Y. et al. Review on forming process of magnesium alloy characteristic forgings / Y. Jiang et al. // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2024. – Vol. 970. – P. 172666. – DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.172666.
- [23] НТУ «ХПІ». MatViz3D Програмний компонент для візуалізації матеріалів // URL: <https://matviz3d.khpi.edu.ua>