



УДК 539.422.32

Численное моделирование микроструктур и процессов разрушения зернистых поликристаллических материалов с учетом влияния межзеренных границ

М. Н. Муллахметов, А. В. Ильиных

Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Россия, 614990, Пермь, Комсомольский пр-т, 29.

Аннотация

Представлен алгоритм компьютерного моделирования микроструктур поликристаллических материалов с явным образом выделенными межзеренными границами. Авторами предложена модификация разработанного ранее алгоритма синтеза зернистых микроструктур, в основе которого лежит процедура пошагового выращивания зерен из эллипсов. Межзеренные границы заданной толщины формируются из исходной зернистой структуры путем смещения исходных границ внутрь зерна. Такой подход позволил сохранить исходную форму зерен, незначительно уменьшив их изначальную площадь.

Преимуществом представленного алгоритма перед другими методами компьютерного моделирования поликристаллических материалов является возможность получения кусочно-линейных межзеренных границ разной толщины, величины которых могут не только быть заданы как различным законам статистического распределения, но и иметь одинаковую величину. При этом сами зерна могут иметь как выпуклую, так и вогнутую форму, которую невозможно получить, используя большинство других методов компьютерного моделирования.

Представлены результаты генерации микроструктур поликристаллических материалов, содержащие более 100 структурных элементов и имеющие долю межзеренных границ до 20%. Представленные микроструктуры поликристаллических материалов сгенерированы при различных начальных параметрах, на примере которых продемонстрированы все возможности разработанного алгоритма. Приведены новые данные

Механика деформируемого твердого тела

Научная статья

© Коллектив авторов, 2023

© СамГТУ, 2023 (составление, дизайн, макет)

 Контент публикуется на условиях лицензии [Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru) (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru>)

Образец для цитирования

Муллахметов М. Н., Ильиных А. В. Численное моделирование микроструктур и процессов разрушения зернистых поликристаллических материалов с учетом влияния межзеренных границ // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2023. Т. 27, № 1. С. 81–101. EDN: [ITZHNJ](https://www.edn.ru/). DOI: [10.14498/vsgtu1931](https://doi.org/10.14498/vsgtu1931).

Сведения об авторах

Максим Николаевич Муллахметов  <https://orcid.org/0000-0002-0884-8327>
лаборант; центр экспериментальной механики; e-mail: m.mullahmetov59@gmail.com

Артём Валерьевич Ильиных  <https://orcid.org/0000-0001-9162-1053>
кандидат технических наук; центр экспериментальной механики; каф. экспериментальной механики и конструкционного материаловедения; e-mail: ilinih@yandex.ru

численного моделирования процессов деформирования и разрушения модельных зернистых материалов, для которых задано разное отношение прочностных характеристик зерен и межзеренных границ. Показано, что в зависимости от величины этого отношения прочностных характеристик в поликристаллических материалах реализуются разные механизмы разрушения: интеркристаллитное, транскристаллитное и смешанная форма разрушения.

Ключевые слова: межзеренные границы, численное моделирование, микроструктура, зернистые поликристаллические материалы, накопленные повреждения, интеркристаллитное разрушение, транскристаллитное разрушение.

Получение: 26 мая 2022 г. / Исправление: 19 ноября 2022 г. /

Принятие: 24 января 2023 г. / Публикация онлайн: 23 марта 2023 г.

Введение. Исследование процессов упруго-хрупкого деформирования структурно-неоднородных сред при учете деградации их упругих свойств, накопления повреждений и макроразрушения является актуальной задачей в области механики деформируемого твердого тела [1]. Использование методов математического моделирования при изучении закономерностей механического поведения позволяет решать задачи механики структурно-неоднородных сред, находящихся в сложных условиях термомеханического нагружения [2, 3].

Поликристаллические металлы и сплавы, некоторые типы керамик и горных пород относятся к неоднородным материалам, имеющим ярко выраженную зернистую структуру. Геометрические параметры зернистых структур (размеры и форма зерен, механические свойства зерен и межзеренных границ) влияют на закономерности механического поведения поликристаллических материалов [4–16]. В работах [4–7] исследуются особенности микро- и макроразрушения поликристаллических материалов, связанные с наличием в структуре пор и микротрещин, со случайным распределением механических свойств структурных элементов. В работе [4] приводятся результаты, указывающие на влияние межзеренных границ на распространение трещин. Показано, что высокая прочность керамических частиц (зерен) по сравнению со свойствами матрицы вызывает разрушение и локализацию дефектов вдоль границ зерен. В работе [11] представлены результаты, показывающие увеличение деформационных характеристик при увеличении объемной доли более крупных зерен в микроструктуре цирконий-ниобиевых сплавов.

Применение методов математического моделирования в области исследования механического поведения структурно-неоднородных сред позволяет исследователям успешно решать сложные задачи механики деформированного твердого тела. Для увязки особенностей механического поведения с геометрическими параметрами структур требуется разработка сложных алгоритмов и программных комплексов для создания компьютерных моделей микроструктур конструкционных материалов. Развитие вычислительной техники позволяет создавать модели структуры материалов с большим количеством внутренних переменных (для зернистых структур такими переменными являются количество, форма, размеры и ориентация зерен, объемная доля меж-

зеренных границ и т.п.) и с различными микроструктурными дефектами (поры, микротрещины, отслаивания и т.д.). Алгоритмы генерации структурно-неоднородных сред на основе стохастических параметров находят применение в различных областях [4–22]. К настоящему времени предложены несколько подходов к генерации моделей зернистых микроструктур:

- использование диаграмм Вороного [5, 6];
- методика последовательного «выращивания» геометрических объектов простой формы [7];
- применение клеточных автоматов [8].

Учет геометрических характеристик структурной неоднородности необходим при изучении механического поведения металлов [9–12], различных композитных материалов [13–15], горных пород [15–19], керамических материалов [18, 19]. Анализ результатов численного моделирования материалов зернистой структуры позволяет дать оценку механизмам разрушения и выявить закономерности процесса накопления повреждений в структурно-неоднородных материалах при циклических, статических и квазистатических нагрузках [13, 14, 17]. В работе [15] показано, что влияние микроструктуры на макромеханическое поведение горных пород невелико, однако оказывает сильное воздействие на механизмы разрушения и накопления повреждений. Также в работе [17] приводятся результаты, показывающие влияние среднего размера зерен на механические характеристики каменной соли: чем меньше средний диаметр зерна и индекс неоднородности, тем выше прочностные и пластические характеристики.

Во многих работах отмечается важность моделирования процессов микроразрушения поликристаллических материалов с учетом межзеренных границ, механические свойства которых могут значительно отличаться от свойств зерен [4–6, 15, 18, 20].

В частности, в зависимости от соотношения прочностных характеристик зерен и межзеренных границ исследователями выделяются три механизма разрушения: транскристаллитное, интеркристаллитное и смешанная форма разрушения. В работе [12] приведено исследование влияния углов ориентации межзеренных границ на механическое поведение материала (палладия) в условиях одноосного растяжения. Представлены результаты, согласно которым зарождение дефектов начинается на большеугловых границах (границах, относящихся к зернам с большим углом ориентации относительно оси деформации), также показана большая устойчивость малоугловых границ зерен к интеркристаллитному разрушению.

Проведенный обзор научных работ свидетельствует о том, что в материалах, имеющих зернистую структуру, одним из важных направлений исследований является изучение различных типов структурного разрушения. Анализ рассмотренных источников показывает, что на механическое поведение поликристаллических материалов значительное влияние оказывают не только характеристики зерен, но также и связи между ними — межзеренная граница. При этом соотношение механических характеристик межзеренных границ и самих зерен будет воздействовать на характер разрушения материала. Для комплексного изучения влияния параметров зерен и межзеренных границ на механическое поведение зернистых материалов актуальным является разработка алгоритма и программного комплекса, позволяющих по-

лучить геометрические модели зернистых структур с явным образом выделенными межзеренными границами.

Целью данной работы является разработка нового алгоритма компьютерного моделирования микроструктур поликристаллических материалов с явно выделенными межзеренными границами, генерация новых моделей структур с заданными геометрическими параметрами и исследование закономерностей процессов структурного разрушения зернистых композитов на основе полученных структур. Научная новизна работы состоит в разработке нового алгоритма и получении на его основе новых плоских микроструктур поликристаллических материалов с явно выраженными межзеренными границами заданной ширины. Также получены новые результаты численного моделирования процессов накопления повреждений и макроразрушения модельных зернистых композитов при различных соотношениях прочностных характеристик зерен и межзеренных границ, иллюстрирующие влияние этого отношения на реализацию интеркристаллитного и транскристаллитного механизмов структурного разрушения.

1. Алгоритм выделения межзеренных границ. Предложенный авторами алгоритм выделения межзеренных границ заданной толщины является модификацией разработанного ранее алгоритма синтеза зернистых микроструктур¹. В качестве исходных данных для представляемого алгоритма используется информация о зернистых структурах, в которых имеется идеальный контакт между отдельными зёрнами, что не позволяет провести анализ влияния этих границ на некоторые особенности механического поведения поликристаллических материалов, в частности, нет возможности численного моделирования интеркристаллитного типа разрушения.

1.1. На первом этапе производится перенумерация всех узлов каждого зерна таким образом, чтобы обеспечивалась последовательная нумерация узлов по часовой стрелке относительно центра зерна. Результат сортировки показан на рис. 1.

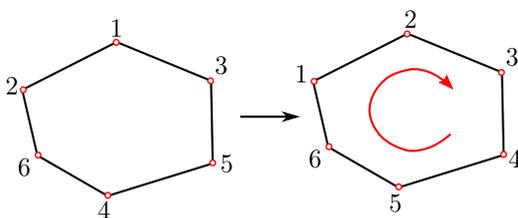


Рис. 1. Результат сортировки узлов зерна
[Figure 1. Result of grain nodes sorting]

1.2. На втором этапе вычисляются нормали к каждой границе зерна. При этом сортировка, выполненная на первом этапе, позволяет получать нормали, направленные внутрь зерна. Вычисление векторов нормалей \bar{n}_i в декартовой системе координат производится по следующей формуле:

$$\bar{n}_i = \{(y_2 - y_1)_i; (x_1 - x_2)_i\},$$

¹Программный комплекс по моделированию микроструктур зернистых композиционных материалов «Синтез зернистых микроструктур». Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ № 2011610135.

где (x_1, y_1) , (x_2, y_2) — координаты узлов i -той границы зерна. Результат вычисления нормалей для отдельного зерна представлен на рис. 2.

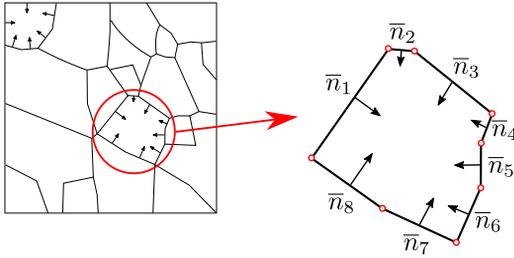


Рис. 2. Расчет нормалей границ зерна
[Figure 2. Calculation of grain boundary normals]

Полученные векторы нормалей имеют различную длину, зависящую от длины границы, для которой они вычисляются. Длины найденных векторов нормируются к величине $|\bar{n}| = 1$ с целью последующего выделения межзеренных границ заданной толщины:

$$\bar{n}_i = \left\{ \frac{n_{ix}}{|\bar{n}_i|}; \frac{n_{iy}}{|\bar{n}_i|} \right\}.$$

1.3. На третьем этапе для каждой границы определяется новое положение путем добавления к исходным координатам узлов смещения δ , помноженного на соответствующую компоненту вектора нормали. Тогда координаты узлов (x'_1, y'_1) и (x'_2, y'_2) смещенной границы определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1 + \delta \cdot \bar{n}_{ix}, & y'_1 &= y_1 + \delta \cdot \bar{n}_{iy}; \\ x'_2 &= x_2 + \delta \cdot \bar{n}_{ix}, & y'_2 &= y_2 + \delta \cdot \bar{n}_{iy}. \end{aligned}$$

Умножение величины заданного смещения δ на компоненты нормированного вектора нормали позволяет смещать узлы границы на заданную величину. Результатом этой операции является новое положение границ зерна, смещенных внутрь зерна на заданную величину δ (см. рис. 3).

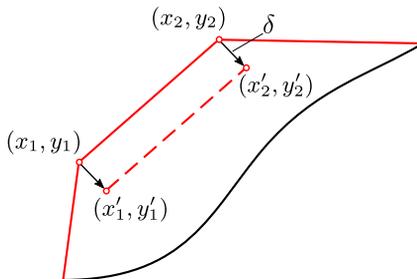


Рис. 3. Смещение узловых точек границы зерна (сплошная линия — начальная граница, штриховая линия — новая граница)
[Figure 3. Offset of the nodal points of the grain boundary (solid line — the original boundary, dashed line — the new boundary)]

1.4. На четвертом этапе алгоритма определяются новые положения узлов зерен, совпадающие с точками пересечения прямых. Уравнения полученных

прямых определяются по двум точками с новыми координатами, рассчитанными на третьем этапе алгоритма. На рис. 4 показана схема нахождения новых узлов зерен.

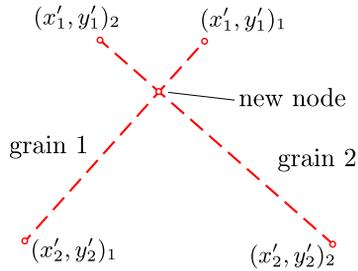


Рис. 4. Определение новых узловых точек зерна
[Figure 4. Determination of new nodal points of the grain]

На основе представленного алгоритма для исследования влияния свойств межзеренных границ на механическое поведение поликристаллических материалов была проведена модернизация программного комплекса «Синтез зернистых микроструктур» (свид. о регистр. № 2011610135).

2. Результаты работы алгоритма генерации структур. Представлены результаты генерации микроструктур и оценка распределения размеров зерен для различных структур, изображенных на рис. 5–8. В предложенном ранее алгоритме был введен ряд геометрических параметров, краткое описание которых приведено в табл. 1. В предложенной модификации авторами введен дополнительный параметр δ , отвечающий за величину смещения границ. Для статистического описания полученных микроструктур выбран геометрический параметр — площадь зерен, вид закона распределения которой оценивался с использованием критериев χ^2 и Колмогорова—Смирнова [21].

Результаты проверки представлены в табл. 2. Критическое значение критерия Колмогорова—Смирнова равно 1.95 при уровне значимости 0.9, для критерия χ^2 критическое значение равно 72.3 при уровне значимости 0.9.

На рис. 5 показано влияние коэффициента формы зерен на вид микроструктуры. Видно, что при уменьшении коэффициента формы зерна приобретают более вытянутую форму границ.

Влияние задаваемого угла ориентации начальных эллипсов показано на рис. 6. Видно, что структура № 3 имеет зерна с явно выраженной преимущественной ориентацией.

На рис. 7 представлены результаты генерации микроструктур, полученных из начальных эллипсов с разными коэффициентами размера (см. табл. 2). Видно, что структура № 6 имеет большее различие в размерах зерен по сравнению со структурой № 5.

На рис. 8 представлены микроструктуры с различной долей межзеренных границ. На структуре № 8 заметны более широкие границы, что и обуславливает увеличение процентной доли межзеренных границ.

В программном комплексе прописан модуль, позволяющий экспортировать микроструктуры в пакет конечно-элементного анализа ANSYS, в котором затем решаются задачи деформирования и разрушения материалов с зернистой структурой.

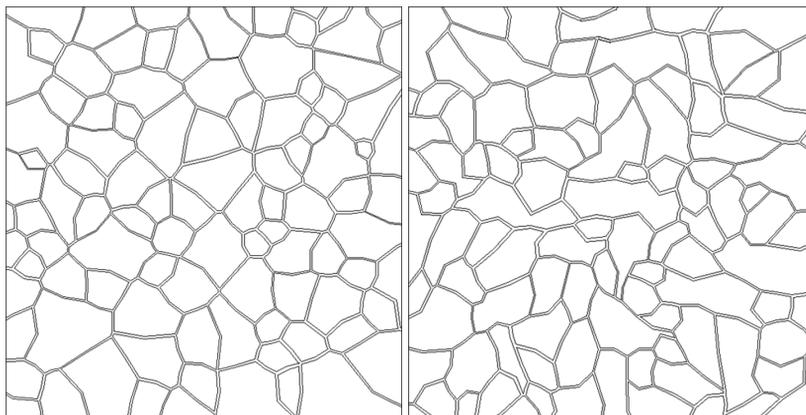


Рис. 5. Структуры № 1 и № 2
[Figure 5. Structures no.1 and no.2]

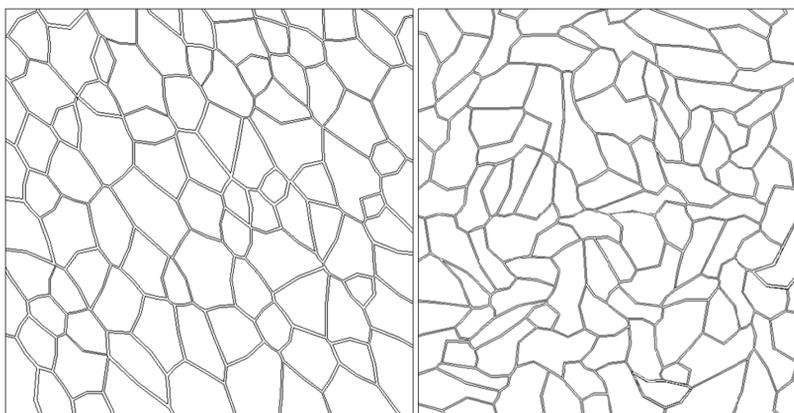


Рис. 6. Структуры № 3 и № 4
[Figure 6. Structures no.3 and no.4]

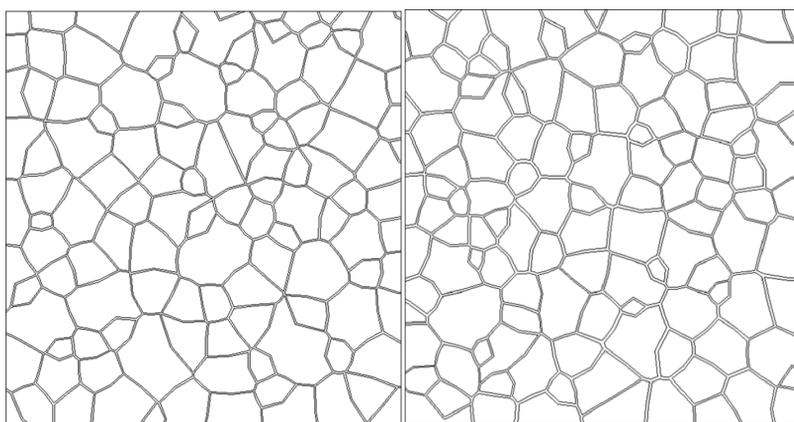


Рис. 7. Структуры № 5 и № 6
[Figure 7. Structures no.5 and no.6]

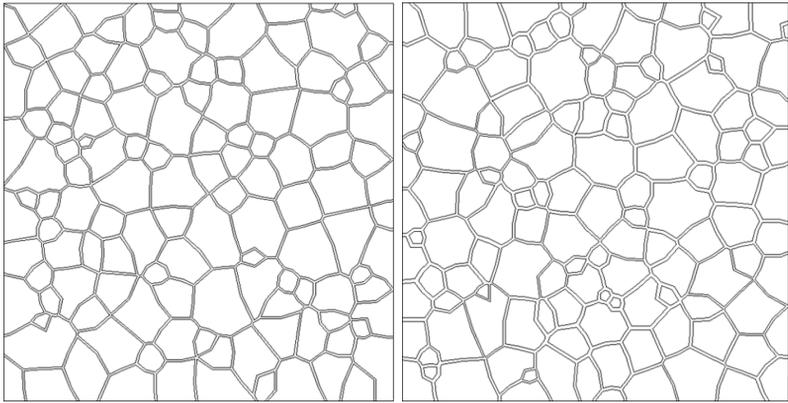


Рис. 8. Структуры № 7 и № 8
[Figure 8. Structures no.7 and no.8]

Таблица 1

Описание параметров генерации [Description of generation parameters]

Параметры [Parameters]	Описание [Description]
N	Количество зерен в структуре [The number of grains in the structure]
k_f	Коэффициент формы, выражающийся в отношении меньшей полуоси эллипса к большей [The shape factor expressed as the ratio of the minor semi-axis of the ellipse to the major]
k_r	Коэффициент размера, показывающий отношение большей полуоси наименьшего эллипса к большей полуоси наибольшего эллипса [The size factor showing the ratio of the major semi-axis of the smallest ellipse to the major semi-axis of the largest ellipse]
α	Угол ориентации начальных эллипсов [The orientation angle of initial ellipses]
δ	Величина смещения границы [The border offset value]

3. Постановка задачи упруго-хрупкого деформирования структурно-неоднородных сред при учете деградации их упругих свойств.

Рассматриваются модельные поликристаллические материалы, состоящие из множества отдельных структурных элементов, которые разделены между собой границами разной толщины и обладают различными прочностными свойствами. Для описания процессов упруго-хрупкого деформирования структурно-неоднородных сред при учете деградации их упругих свойств используется двухуровневая структурно-феноменологическая модель. Для структурно-неоднородных материалов определяющие соотношения, включающие функцию поврежденности в виде тензора четвертого ранга, представляются в следующем виде [23]:

$$\sigma_{ij,j}(r) = 0,$$

Таблица 2
Полученные параметры структур [Received structure parameters]

no. of structures	Заданные геометрические параметры [Given geometric parameters]				Полученные геометрические параметры [Obtained geometric parameters]			закон распределения площадей зерен [type of grain area distribution]
	N	k_f	k_r	α (in grad)	доля границ, % [proportion of borders, %]	критерий χ^2 [χ^2 test]	критерий Колмогорова–Смирнова [Kolmogorov–Smirnov test]	
1	100	0.8	0.7	25	12	2.71	0.72	равномерный [uniform distribution]
2	100	0.4	0.7	25	14	4.94	1.31	нормальный [normal distribution]
3	110	0.6	0.9	45	20	4.55	0.69	нормальный [normal distribution]
4	100	0.3	0.8	0–180	13	1.55	0.55	равномерный [uniform distribution]
5	120	1.0	0.6	0	10	6.64	1.36	нормальный [normal distribution]
6	120	1.0	0.3	0	15	6.93	1.43	нормальный [normal distribution]
7	130	1.0	0.3	0	0	3.05	0.75	равномерный [uniform distribution]
8	130	1.0	0.6	0	25	2.87	1.16	равномерный [uniform distribution]

$$\varepsilon_{ij}(r) = \frac{1}{2}[u_{i,j}(r) + u_{j,i}(r)],$$

$$\sigma_{ij}(r) = C_{ijkl}(r)(I_{klmn} - \Omega_{klmn}(r, [\sigma]))\varepsilon_{mn}(r).$$

В приведенных уравнениях приняты следующие обозначения: σ_{ij} и ε_{ij} — компоненты тензора напряжений и деформаций соответственно; r — радиус-вектор с компонентами r_j ; C_{ijkl} — компоненты тензора упругих модулей; $I_{klmn} = (\delta_{km}\delta_{ln} + \delta_{kn}\delta_{lm})/2$ — компоненты единичного тензора; δ_{kn} — символ Кронекера; Ω_{klmn} — компоненты тензора поврежденности четвертого ранга; $[\sigma]$ — прочностные константы материала.

Принимаем, что модули упругости и коэффициенты Пуассона у всех структурных элементов и межзеренных границ одинаковы. Тогда для случая изотропной среды, упругие характеристики которой описываются модулями объемного сжатия $K(r)$ и сдвига $G(r)$, мерами тензора поврежденности Ω являются независимые материальные функции k и g . Эти функции выражают изменение деформационных свойств, зависят от интенсивности напряжений и входят в определяющие соотношения:

$$\sigma_{ij}(r) = [3K(r)(1 - k)D_{ijmn} + 2G(r)(1 - g)H_{ijmn}]\varepsilon_{mn}(r),$$

где $D_{ijmn} = \delta_{ij}\delta_{mn}/3$, $H_{ijmn} = I_{ijmn} - D_{ijmn}$.

Допустим, что материальные функции k и g зависят только от интенсивности напряжений и скачкообразным образом изменяют свои значения от 0 до 1 в зависимости от выполнения следующих условий:

$$k(\sigma_I) = g(\sigma_I) = \begin{cases} 1, & \sigma_I \geq [\sigma], \\ 0, & \sigma_I < [\sigma], \end{cases}$$

где $\sigma_I = \sqrt{((\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2)/2}$ — интенсивность напряжений, $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ — главные напряжения.

Представленная схема изменения материальных функций изотропной среды k и g соответствует подходу Качанова—Работнова, в рамках которого для описания процесса накопления повреждений используется безразмерный параметр поврежденности ω .

Для получения прочностных констант структурных элементов используется трехпараметрический закон распределения Вейбулла, выражающийся следующей зависимостью [23]:

$$F([\sigma]) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{[\sigma] - \sigma_0}{\sigma_a - \sigma_0}\right)^b\right],$$

где $\sigma_0 > 0$ — параметр минимальной прочности, σ_a — параметр распределения Вейбулла, $b > 0$ — параметр формы. Параметры распределения случайных величин связаны с коэффициентом вариации k_v и математическим ожиданием $\langle \sigma \rangle$ следующими соотношениями:

$$\sigma_0 = \langle \sigma \rangle \cdot \left[1 - \frac{k_v \cdot C_1}{\sqrt{C_2 - C_1^2}}\right], \quad \sigma_a = \frac{k_v \cdot \langle \sigma \rangle}{\sqrt{C_2 - C_1^2}} + \sigma_0,$$

где $C_1 = \Gamma(1 + 1/b)$, $C_2 = \Gamma(1 + 2/b)$, $\Gamma(z)$ — гамма-функция.

Применение функций генерирования псевдослучайных величин, заложенных в языках программирования, позволяет получать псевдослучайные числа ξ , равномерно распределенные в интервале $[0, 1]$. Тогда прочностные константы определяются по следующей формуле:

$$[\sigma] = \sigma_0 + (\sigma_a - \sigma_0) \cdot (-\ln \xi)^{1/b}.$$

При генерации случайных чисел коэффициент формы $b = 5$, коэффициент вариации $k_v = 0.8$, а среднее значение прочности зерен $\langle \sigma_g \rangle$ задается в соответствии с поставленной задачей.

Полученные модели структурно-неоднородных сред можно использовать для решения краевых задач механики. Для этого в программном пакете конечно-элементного анализа ANSYS проводятся расчеты последовательных статических задач в условиях одноосного растяжения. Граничные условия в соответствии со схемой нагружения, представленной на рис. 9: фиксируются перемещения на нижней и левой гранях области деформирования, а на верхней грани задается некоторое перемещение U , вычисляемое заново на каждом шаге расчета.

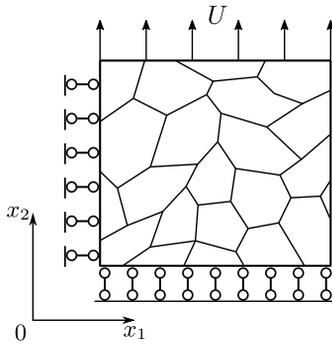


Рис. 9. Схема нагружения
[Figure 9. Loading scheme]

Для решения поставленной задачи используется алгоритм последовательного нагружения, представляющий собой итерационную процедуру [24], позволяющую исключать из модели конечные элементы, в которых перестает выполняться критерий прочности. Исключение конечного элемента реализуется путем многократного снижения его жесткости.

На начальном этапе, когда неизвестно необходимое удлинение для разрушения элемента с наименьшим запасом прочности, задается некоторое малое начальное удлинение U , при котором реализуется деформация не более 0.001 %. Это удлинение малой величины необходимо для расчета следующего шага удлинения U' , при котором разрушается конечный элемент с наименьшим запасом прочности. После его разрушения в модели происходит перераспределение напряжений, которое может привести к последующему разрушению других элементов. Итерационная процедура построена таким образом, чтобы на каждой итерации разрушался только один конечный элемент. Для реализации такой схемы разрушения конечных элементов использована процедура автоматического расчета шага нагружения. В этой процедуре

вводится коэффициент t , который равен минимальному отношению предела прочности i -того конечного элемента к интенсивности напряжений:

$$t = \min([\sigma_i]/\sigma_{Ti}).$$

Тогда следующий шаг удлинения определяется по формуле

$$U' = U \cdot t.$$

Используя такой подход, можно реализовать пошаговое разрушение конечных элементов и отследить процессы лавинообразного разрушения, заключающиеся в последовательном разрушении конечных элементов при фиксированном значении деформации вследствие перераспределения полей напряжений. Разработанный алгоритм был реализован в программном пакете конечно-элементного анализа ANSYS для численного моделирования процессов деформирования и разрушения структурно-неоднородных сред при случайном распределении прочностных констант.

Для демонстрации работы итерационного алгоритма представлено решение тестовой задачи. В качестве начальных параметров структурно-неоднородной среды заданы следующие данные: количество зерен $N = 100$; коэффициенты формы и размера зерен $k_f = 0.85$, $k_r = 0.7$; доля межзеренных границ 10%; среднее значение предела прочности зерен $\langle\sigma_g\rangle = 7.5$ МПа; модуль Юнга $E = 20$ ГПа; коэффициент Пуассона $\nu = 0.2$; отношение прочностных характеристик межзеренных границ и зерен $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1.5$ (здесь и далее σ_b — значение предела прочности межзеренных границ).

В качестве результатов численного моделирования тестовой задачи на рис. 10 приведены диаграмма деформирования и график накопления повреждений, на рис. 11 — картины структурных дефектов на различных стадиях нагружения.

Представленная на рис. 10 диаграмма поврежденности отражает процентную долю площади разрушенных конечных элементов к исходной площади области деформирования. На приведенной диаграмме деформирования видны срывы, которые иллюстрируют эффект лавинообразного разрушения, характерный при разрушении хрупких материалов. Связано это с итерационным разрушением нескольких конечных элементов вследствие перераспределения напряжений при фиксированном шаге нагружения.

Циклическая процедура завершается при условии наступления состояния устойчивости, т.е. такой ситуации, когда во всех конечных элементах выполняется критерий прочности. Далее подбирается следующий шаг по перемещению и снова запускается итерационная процедура разрушения конечных элементов. Завершение расчета определяется по силовому отклику системы, когда усилие становится близким к нулю.

На рис. 11 приведены картины структурных дефектов для четырех значений деформаций, которые отмечены точками на диаграмме деформирования (см. рис. 10) и иллюстрируют развитие трещины в поликристаллическом модельном материале. На представленных картинах структурных дефектов видно, что в процессе деформирования разрушаются как конечные элементы зерен (закрашены белым цветом), так и конечные элементы межзеренных границ (закрашены красным цветом). На рисунках можно проследить

влияние разрушения межзеренных границ на диаграмму деформирования. В частности, на рис. 10 между точками 2 и 3 имеется резкое снижение напряжений на величину порядка 70% от максимального значения напряжений. Такое резкое снижение напряжений обусловлено в основном разрушением межзеренных границ. Другие, меньшие по величине, скачки напряжений на этом же участке соответствуют в основном разрушению отдельных зерен.

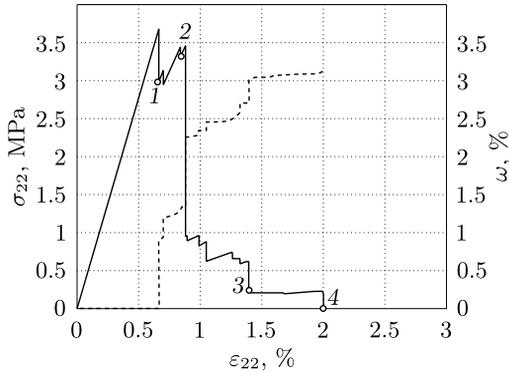


Рис. 10. Диаграмма деформирования (сплошная линия) и график накопления повреждений (штриховая линия)

[Figure 10. Deformation diagram (solid line) and damage accumulation diagram (dashed line)]

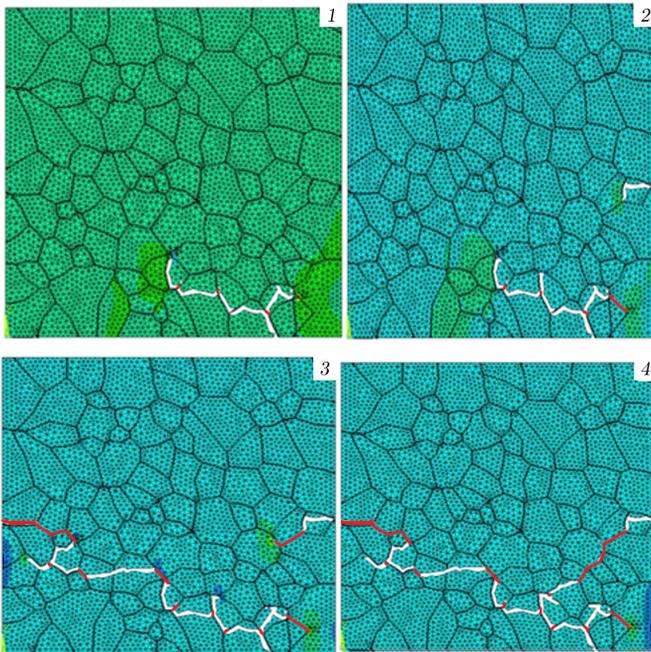


Рис. 11. Эволюция структурных дефектов (онлайн в цвете)

[Figure 11 (color online). Evolution of structural defects]

4. Результаты численного моделирования процессов разрушения модельных поликристаллических материалов. В ходе работы по численному моделированию механического поведения модельных зернистых композитов решались задачи определения условий реализации различных сценариев развития дефектов в поликристаллических материалах:

- интеркристаллитное разрушение — распространение трещины по границам зерен;
- транскристаллитное — распространение трещины через зерна;
- смешанный режим разрушения, сочетающий в себе как транскристаллитное, так и интеркристаллитное разрушение.

В качестве такого условия рассматривается только величина соотношения прочностных характеристик зерен и межзеренных границ.

Для выявления механизмов развития дефектов была выполнена серия расчетов на модельном зернистом композите, для которого упругие и прочностные свойства зерен заданы аналогично механическим свойствам, приведенным в третьей части статьи. Геометрические параметры зернистой структуры заданы следующим образом: $N = 100$, $k_f = 0.8$, $k_r = 0.7$, доля межзеренных границ составляет 10%. Прочностные характеристики межзеренных границ определялись через отношение $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle$, которое варьировалось в диапазоне от 0.1 до 3 с шагом 0.02.

На представленных ниже изображениях (см. рис. 12) показаны характерные для различных сценариев разрушения картины дефектов, полученные при соотношениях $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 0.28$ (транскристаллитное разрушение), $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1$ (смешанное разрушение) и $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 2.2$ (интеркристаллитное разрушение). Для наглядности разрушенные конечные элементы зерен закрашены оранжевым цветом, а конечные элементы межзеренных границ — красным цветом (см. рис. 12). Для этих же соотношений прочностных характеристик на рис. 13 приведены расчетные диаграммы деформирования с ниспадающими участками.

При интеркристаллитном разрушении практически отсутствуют механизмы, тормозящие рост трещины, что соответствует полному вырождению нис-

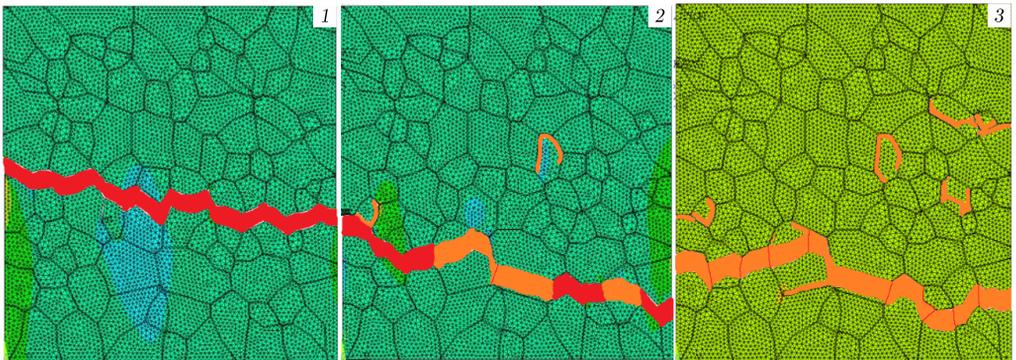


Рис. 12. Картины структурных дефектов при интеркристаллитном, транскристаллитном и смешанном режимах разрушения: 1) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 0.28$, 2) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1$, 3) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 2.2$ (онлайн в цвете)

[Figure 12 (color online). Patterns of structural defects in intercrystalline, transcrystalline and mixed fracture modes: 1) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 0.28$, 2) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1$, 3) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 2.2$]

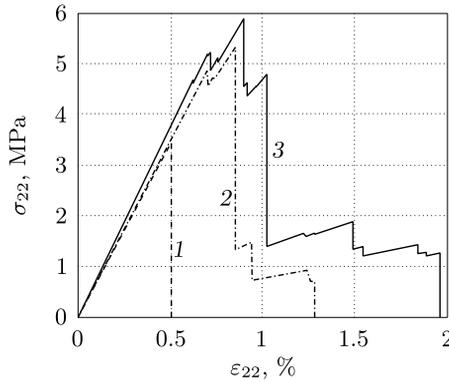


Рис. 13. Диаграммы деформирования для структур с различными соотношениями прочностных характеристик: 1) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 0.28$, 2) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1$, 3) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 2.2$

[Figure 13. Strain diagrams for structures with different ratios of strength characteristics: 1) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 0.28$, 2) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1$, 3) $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 2.2$]

падающего участка диаграммы деформирования (линия 1 на рис. 13). Вырождение ниспадающей ветви на закритической стадии деформирования в случае интеркристаллитного разрушения обусловлено лавинообразным разрушением только межзеренных границ при деформации, равной 0.5 %.

В случае транскристаллитного разрушения причиной торможения роста трещин является наличие между зернами межзеренных границ, обладающих повышенными прочностными характеристиками по сравнению с зернами. На рис. 13 это проиллюстрировано диаграммой деформирования (линия 3) для соотношения $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 2.2$. Закритическая стадия на этой диаграмме деформирования имеет большую продолжительность (до величины деформации около 2%), что обусловлено процессами образования не связанных между собой структурных дефектов в зернах с наименьшим запасом прочности и последующим слиянием их в магистральную трещину посредством разрушения межзеренных границ. Доля разрушенных конечных элементов, принадлежащих межзеренным границам, для такого сценария разрушения минимальна.

В случае смешанного характера процесс разрушения протекает как по межзеренным границам, так и по зернам с наименьшим запасом прочности. Соответствующая этому сценарию разрушения диаграмма деформирования показана линией 2 на рис. 13 для соотношения $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle = 1$. Увеличение доли разрушенных конечных элементов межзеренных границ приводит к вырождению ниспадающего участка на диаграмме деформирования.

По результатам проведенных расчетов для рассматриваемого модельного поликристаллического материала при других соотношениях $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle$ были определены условия, при которых реализуется тот или иной сценарий разрушения: при значениях соотношения прочностных характеристик межзеренных границ и зерен $\sigma_b/\langle\sigma_g\rangle < 0.3$ наблюдается только интеркристаллитное разрушение, при значениях соотношения прочностных характеристик в диапазоне от 0.3 до 2 характер разрушения представляет собой совокупность интеркристаллитного и транскристаллитного типа, а при значениях свыше 2 преобладает в основном транскристаллитный механизм структурного разрушения (см. рис. 14).

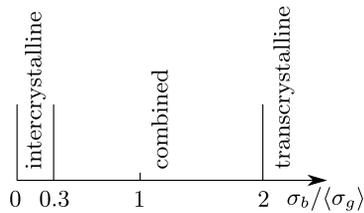


Рис. 14. Границы перехода между сценариями разрушения
[Figure 14. Borders of transition between failure scenarios]

Выводы. Разработана модификация для ранее предложенного алгоритма синтеза микроструктур, заключающаяся в явном выделении межзеренных границ. Представлены микроструктуры, сгенерированные с различными заданными параметрами, такими как коэффициент формы зерен, коэффициент размера, угол преимущественной ориентации зерен, толщина межзеренных границ. Толщины межзеренных границ могут быть заданы постоянными как по величине, так и по заданному закону распределения. Данная модификация позволяет сохранить исходную форму зерен, не внося тем самым существенных изменений в геометрию микроструктуры.

Выявлены факторы, влияющие на переход между сценариями разрушения. Основным таким фактором является соотношение прочностных характеристик зерен и межзеренных границ. Показано, что чем меньше соотношение указанных прочностных характеристик, тем больший вклад вносит интеркристаллитное разрушение, и наоборот, чем выше указанное соотношение, тем больше дефектов развивается внутри зерен, обеспечивая появление ниспадающей ветви деформирования, которой не наблюдается в случае явного интеркристаллитного разрушения.

Конкурирующие интересы. Заявляем, что в отношении авторства и публикации этой статьи конфликта интересов не имеем.

Авторский вклад и ответственность. Все авторы принимали участие в разработке концепции статьи и в написании рукописи. Авторы несут полную ответственность за предоставление окончательной рукописи в печать. Окончательная версия рукописи была одобрена всеми авторами.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FSNM-2020-0027).

Библиографический список

1. Вильдеман В. Э., Третьяков М. П., Третьякова Т. В. [и др.] *Экспериментальные исследования свойств материалов при сложных термомеханических воздействиях* / ред. В. Э. Вильдеман. М.: Физматлит, 2012. 204 с. EDN: [UGLGZL](#).
2. Волегов П. С., Грибов Д. С., Трусов П. В. Поврежденность и разрушение: классические континуальные теории // *Физ. мезомех.*, 2015. Т. 18, № 4. С. 68–87. EDN: [UGCJQL](#).
3. Yankin A. S. Biharmonic (two-frequency) load frequencies influence on mechanical behavior of solid propellant simulator // *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015. no. 4. pp. 273–292. EDN: [VBWYNN](#). DOI: <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2015.4.16>.
4. Balokhonov R., Romanova V., Kulkov A. Microstructure-based analysis of deformation and fracture in metal-matrix composite materials // *Eng. Fail. Anal.*, 2020. vol. 110, 104412. EDN: [KTCEOH](#). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2020.104412>.

5. Liang K., Xie L., He B., et al. Effects of grain size distributions on the macro-mechanical behavior of rock salt using micro-based multiscale methods // *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 2021. vol. 138, 104592. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmmms.2020.104592>.
6. Naderi S., Dean J. S., Zhang M. Three-dimensional virtual microstructure generation of porous polycrystalline ceramics // *Ceramics International*, 2019. vol. 45, no. 17. pp. 21647–21656. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.07.162>.
7. Ильиных А. В., Вильдеман В. Э. Моделирование структуры и процессов разрушения зернистых композитов // *Вычисл. мех. сплош. сред.*, 2012. Т. 5, № 4. С. 443–451. EDN: **PLBSKT**. DOI: <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2012.5.4.52>.
8. Mohebbi M. S., Ploshikhin V. Implementation of nucleation in cellular automaton simulation of microstructural evolution during additive manufacturing of Al alloys // *Additive Manufacturing*, 2020. vol. 36, 101726. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101726>.
9. Roy U., McDowell D. L., Zhou M. Effect of grain orientations on fracture behavior of polycrystalline metals // *J. Mech. Phys. Solids*, 2021. vol. 151, 104384. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104384>.
10. Kowalski N., Delannay L., Yan P., et al. Finite element modeling of periodic polycrystalline aggregates with intergranular cracks // *Int. J. Solids Struct.*, 2016. vol. 90. pp. 60–68. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.04.010>.
11. Скрипняк Н. В., Иохим К. В. Влияние распределения зерен по размерам на прочностные и деформационные свойства сплавов Zr-Nb при высокоскоростном растяжении // *Вестн Том. гос. ун-та. Математика и механика*, 2020. № 65. С. 124–136. EDN: **NDBIXH**. DOI: <https://doi.org/10.17223/19988621/65/10>.
12. Bachurin D. V. Influence of grain boundary misorientation on intergranular fracture of nanocrystalline palladium // *Int. J. Fract.*, 2018. vol. 214, no. 1. pp. 69–78. EDN: **QKWFSK**. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10704-018-0319-2>.
13. Zhou G., Sun Q., Li D., et al. Meso-scale modeling and damage analysis of carbon/epoxy woven fabric composite under in-plane tension and compression loadings // *Int. J. Mech. Sci.*, 2021. vol. 190, 105980. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.105980>.
14. Loendersloot R., Ehsani M., Sepehry N., Shamshirsaz M. Numerical modelling of stochastic fatigue damage accumulation in thick composites / *European Workshop on Structural Health Monitoring. EWSHM 2020* / Lecture Notes in Civil Engineering, 128; eds. P. Rizzo, A. Milazzo. Cham: Springer, 2021. pp. 776–787. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-64908-1_72.
15. Yu H., Dahi Taleghani A., Lian Z. A new look at rock mechanical behavior from the meso-scale grain // *J. Petrol. Sci. Eng.*, 2021. vol. 200, 108373. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.108373>.
16. Zhu Q., Kondo D., Shao J., Pensee V. Micromechanical modelling of anisotropic damage in brittle rocks and application // *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 2008. vol. 45, no. 4. pp. 467–477. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmmms.2007.07.014>.
17. Liang K., Xie L., He B., et al. Effects of grain size distributions on the macro-mechanical behavior of rock salt using micro-based multiscale methods // *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 2021. vol. 138, 104592. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmmms.2020.104592>.
18. Kovalski E. R., Karpov G. N., Leisle A. V. Geomechanic models of jointed rock mass // *Int. J. Civil Eng. Technol.*, 2018. vol. 9, no. 13. pp. 440–448. EDN: **PAZCJR**.
19. Silberschmidt V. V. Effect of material's randomness on scaling of crack propagation in ceramics // *Int. J. Fract.*, 2006. vol. 140, no. 1–4. pp. 73–85. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10704-005-3994-8>.
20. Silberschmidt V. V., Najjar J. Computational modelling of the size effect of damage inhomogeneity in ceramics // *Comput. Mater. Sci.*, 1998. vol. 13, no. 1–3. pp. 160–167. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(98\)00057-3](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(98)00057-3).
21. Ильиных А. В., Радионова М. В., Вильдеман В. Э. Компьютерный синтез и статистический анализ распределения структурных характеристик зернистых композиционных материалов // *Механика композиционных материалов и конструкций*, 2010. Т. 16, № 2. С. 251–264. EDN: **MSXPNN**.

22. Вильдеман В. Э., Ильиных А. В. Моделирование процессов структурного разрушения и масштабных эффектов разупрочнения на закритической стадии деформирования неоднородных сред // *Физ. мезомех.*, 2007. Т. 10, № 4. С. 23–29. EDN: [IJIWGV](#).
23. Вильдеман В. Э., Соколкин Ю. В., Ташкинов А. А. *Механика неупругого деформирования и разрушения композиционных материалов* / ред. Ю. В. Соколкин. М.: Наука, 1997. 288 с. EDN: [SAQBEP](#).
24. Муллахметов М. Н., Ильиных А. В. Численное моделирование процесса разрушения пучков параллельных волокон // *Master's Journal*, 2020. № 1. С. 9–26. EDN: [KNQCWG](#).

MSC: 74E15, 74M25

Computer simulation of microstructures and processes of granular composites fracture taking into account the influence of grain boundaries

*M. N. Mullahmetov, A. V. Ilinykh*Perm State National Research Polytechnical University,
29, Komsomolskiy pr., Perm, 614990, Russian Federation.

Abstract

The paper presents the algorithm for computer simulation of polycrystalline material microstructures with explicitly distinguished grain boundaries. The algorithm is based on the procedure of “growing” structure grains from ellipses, the geometric parameters of which can be set according to different laws of statistical distribution. The grain boundaries of the given thickness are formed from the original granular structure by displacing the boundaries inside the grain. The advantage of the presented algorithm is the possibility of obtaining nonlinear grain boundaries of different thicknesses, the width of which can be specified according to various statistical distribution laws. Polycrystalline material microstructure generation results that contain more than 100 structural elements and have a grain boundary fraction of up to 20% are presented. New data on computer simulation of the deformation process and fracture of simulated granular materials are presented with different ratios of strength characteristics of grains and grain boundaries. It was revealed that, depending on the strength characteristics ratio value, different fracture mechanisms are realized in the material: intercrystalline, transcrystalline, and mixed forms of fracture.

Keywords: grain boundaries, numerical simulations, microstructures, damage accumulation, intercrystalline destroy, transcrystalline destroy.

Received: 26th May, 2022 / Revised: 19th November, 2022 /Accepted: 24th January, 2023 / First online: 23rd March, 2023

Mechanics of Solids

Research Article

© Authors, 2023

© Samara State Technical University, 2023 (Compilation, Design, and Layout)

 The content is published under the terms of the [Creative Commons Attribution 4.0 International License](http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Please cite this article in press as:

Mullahmetov M. N., Ilinykh A. V. Computer simulation of microstructures and processes of granular composites fracture taking into account the influence of grain boundaries, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2023, vol. 27, no. 1, pp. 81–101. EDN: ITTZHJ. DOI: [10.14498/vsgtu1931](https://doi.org/10.14498/vsgtu1931) (In Russian).

Authors' Details:

Maksim N. Mullahmetov  <https://orcid.org/0000-0002-0884-8327>Laboratory Assistant; Center for Experimental Mechanics; e-mail: m.mullahmetov59@gmail.com*Artem V. Ilinykh*  <https://orcid.org/0000-0001-9162-1053>Cand. Techn. Sci.; Center for Experimental Mechanics; Dept. of Experimental Mechanics and Structural Materials Science; e-mail: ilinih@yandex.ru

Competing interests. We declare that we have no conflicts of interest with respect to the authorship and publication of this article.

Authors' contributions and responsibilities. Each author has participated in the development of the concept of the article and in the writing of the manuscript. The authors are absolutely responsible for submitting the final manuscript in print. Each author has approved the final version of the manuscript.

Funding. The work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (no. FSNM–2020–0027).

References

1. Wil'deman V. E., Tret'yakov M. P., Tret'yakova T. V., et al. *Ekspperimental'nye issledovaniia svoistv materialov pri slozhnykh termomekhanicheskikh vozdeistviakh* [Experimental Investigations of Material Properties under Complex Thermomechanical Actions], ed. V. E. Wil'deman. Moscow, Fizmatlit, 2012, 204 pp. (In Russian). EDN: UGLGZL.
2. Volegov P. S., Gribov D. S., Trusov P. V. Damage and fracture: Classical continuum theories, *Phys. Mesomech.*, 2017, vol. 20, no. 2, pp. 157–173. EDN: XNDXWL. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1029959917020060>.
3. Yankin A. S. Biharmonic (two-frequency) load frequencies influence on mechanical behavior of solid propellant simulator, *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2015, no. 4, pp. 273–292. EDN: VBWYNN. DOI: <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2015.4.16>.
4. Balokhonov R., Romanova V., Kulkov A. Microstructure-based analysis of deformation and fracture in metal-matrix composite materials, *Eng. Fail. Anal.*, 2020, vol. 110, 104412. EDN: KTCEOH. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2020.104412>.
5. Liang K., Xie L., He B., et al. Effects of grain size distributions on the macro-mechanical behavior of rock salt using micro-based multiscale methods, *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 2021, vol. 138, 104592. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmmms.2020.104592>.
6. Naderi S., Dean J. S., Zhang M. Three-dimensional virtual microstructure generation of porous polycrystalline ceramics, *Ceramics International*, 2019, vol. 45, no. 17, pp. 21647–21656. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.07.162>.
7. Ilinykh A. V., Wil'deman V. E. Modeling of structure and failure processes of granular composites, *Computational Continuum Mechanics*, 2012, vol. 5, no. 4, pp. 443–451 (In Russian). EDN: PLBSKT. DOI: <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2012.5.4.52>.
8. Mohebbi M. S., Ploshikhin V. Implementation of nucleation in cellular automaton simulation of microstructural evolution during additive manufacturing of Al alloys, *Additive Manufacturing*, 2020, vol. 36, 101726. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101726>.
9. Roy U., McDowell D. L., Zhou M. Effect of grain orientations on fracture behavior of polycrystalline metals, *J. Mech. Phys. Solids*, 2021, vol. 151, 104384. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104384>.
10. Kowalski N., Delannay L., Yan P., et al. Finite element modeling of periodic polycrystalline aggregates with intergranular cracks, *Int. J. Solids Struct.*, 2016, vol. 90, pp. 60–68. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2016.04.010>.
11. Skripnyak N. V., Iokhim K. V. Effect of grain size distribution on the strength and strain properties of Zr-Nb alloys under tension at high strain rates, *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*, 2020, no. 65, pp. 124–136 (In Russian). EDN: NDBIXH. DOI: <https://doi.org/10.17223/19988621/65/10>.
12. Bachurin D. V. Influence of grain boundary misorientation on intergranular fracture of nanocrystalline palladium, *Int. J. Fract.*, 2018, vol. 214, no. 1, pp. 69–78. EDN: QKWFSK. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10704-018-0319-2>.
13. Zhou G., Sun Q., Li D., et al. Meso-scale modeling and damage analysis of carbon/epoxy woven fabric composite under in-plane tension and compression loadings, *Int. J. Mech. Sci.*, 2021, vol. 190, 105980. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.105980>.

14. Loendersloot R., Ehsani M., Sepehry N., Shamshirsaz M. Numerical modelling of stochastic fatigue damage accumulation in thick composites, In: *European Workshop on Structural Health Monitoring. EWSHM 2020*, Lecture Notes in Civil Engineering, 128; eds. P. Rizzo, A. Milazzo. Cham, Springer, 2021, pp. 776–787. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-64908-1_72.
15. Yu H., Dahi Taleghani A., Lian Z. A new look at rock mechanical behavior from the meso-scale grain, *J. Petrol. Sci. Eng.*, 2021, vol. 200, 108373. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.108373>.
16. Zhu Q., Kondo D., Shao J., Pensee V. Micromechanical modelling of anisotropic damage in brittle rocks and application, *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 2008, vol. 45, no. 4, pp. 467–477. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2007.07.014>.
17. Liang K., Xie L., He B., et al. Effects of grain size distributions on the macro-mechanical behavior of rock salt using micro-based multiscale methods, *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.*, 2021, vol. 138, 104592. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2020.104592>.
18. Kovalski E. R., Karpov G. N., Leisle A. V Geomechanic models of jointed rock mass, *Int. J. Civil Eng. Technol.*, 2018, vol. 9, no. 13, pp. 440–448. EDN: PAZCJR.
19. Silberschmidt V. V. Effect of material's randomness on scaling of crack propagation in ceramics, *Int. J. Fract.*, 2006, vol. 140, no. 1–4, pp. 73–85. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10704-005-3994-8>.
20. Silberschmidt V. V., Najar J. Computational modelling of the size effect of damage inhomogeneity in ceramics, *Comput. Mater. Sci.*, 1998, vol. 13, no. 1–3, pp. 160–167. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(98\)00057-3](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(98)00057-3).
21. Radionova M. V., Vildeman V. E., Ilinykh A. V. Computer synthesis and statistical analysis of the distribution of structural characteristics of granular composite materials, *Composites: Mechanics, Computations, Applications*, 2011, vol. 2, no. 2, pp. 95–109. DOI: <https://doi.org/10.1615/compmechcomputapplintj.v2.i2.20>.
22. Wil'deman V. E., Ilinykh A. V. Simulation of structural failure and scale effects of softening at the post-critical deformation stage in heterogeneous media, *Phys. Mesomech.*, 2007, vol. 10, no. 4, pp. 23–29 (In Russian). EDN: IJIWGV.
23. Wil'deman V. E., Sokolkin Yu. V., Tashkinov A. A. *Mekhanika neuprugogo deformirovaniia i razrusheniia kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of Inelastic Deformation and Fracture of Composite Materials], ed. Yu. V. Sokolkin. Moscow, Nauka, 1997, 288 pp. (In Russian). EDN: SAQBEP.
24. Mullakhmetov M. N., Ilinykh A. V. Numerical simulation of the process of destruction of sequentially and parallel associated fibers, *Master's Journal*, 2020, no. 1, pp. 9–26 (In Russian). EDN: KNQCWG.