

01;05.1

©1995

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТАНОВЛЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО РЕЖИМА ДЕФОРМИРОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ТЕЛ МЕТОДОМ ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

*С.Г. Псахье, А.Ю. Смолин, С.Ю. Коростелев,
А.И. Дмитриев, Е.В. Шилько, С.В. Алексеев*

Изучение отклика материалов на мезоскопическом уровне при динамическом нагружении является важной проблемой как с точки зрения практических приложений, так и для развития фундаментальных представлений о возможных механизмах поведения таких систем [1-5]. Для решения такого класса задач в настоящее время главным образом используются методы, основанные на механике сплошных сред. В то же время в моделировании все более широко начинают использоваться дискретные подходы [1,6,7]. Их применение, помимо прочего, требует значительно меньших вычислительных ресурсов. В данной работе развит и применен к изучению проблемы об установлении стационарного режима деформирования твердого тела метод подвижных клеточных автоматов.

В рамках данного метода моделируемый материал представляется как ансамбль элементов, взаимодействующих между собой по определенным правилам. Такие элементы могут составлять отдельные зерна поликристалла, отдельные частицы порошковой смеси и т. д. Размеры элементов определяются условиями конкретной задачи.

Благодаря мобильности отдельных элементов, такой подход позволяет моделировать различные процессы, имеющие место в реальном материале, включая эффекты проникания, массоперенос, эффекты фрагментации, образование трещин и пор. Путем задания дополнительных условий на границах можно имитировать различные режимы механического нагружения (сжатие, растяжение, сдвиговая деформация и др.).

Моделируемая система характеризуется следующими величинами: радиус-векторы элементов $\{\mathbf{R}^i\}$, их поступательные скорости $\{\mathbf{V}^i\}$, углы поворота $\{\theta^i\}$ и угловые скорости $\{\omega^i\}$. Помимо этого каждый элемент характеризуется размерным параметром d^i , массой m^i , а также тензо-

ром момента инерции \hat{J}^i . Взаимодействующие пары элементов делятся на два типа: связанные (linked) — наличие химических связей (элементы одной частицы), независимые (unlinked) — отсутствие каких-либо химических связей (элементы разных частиц).

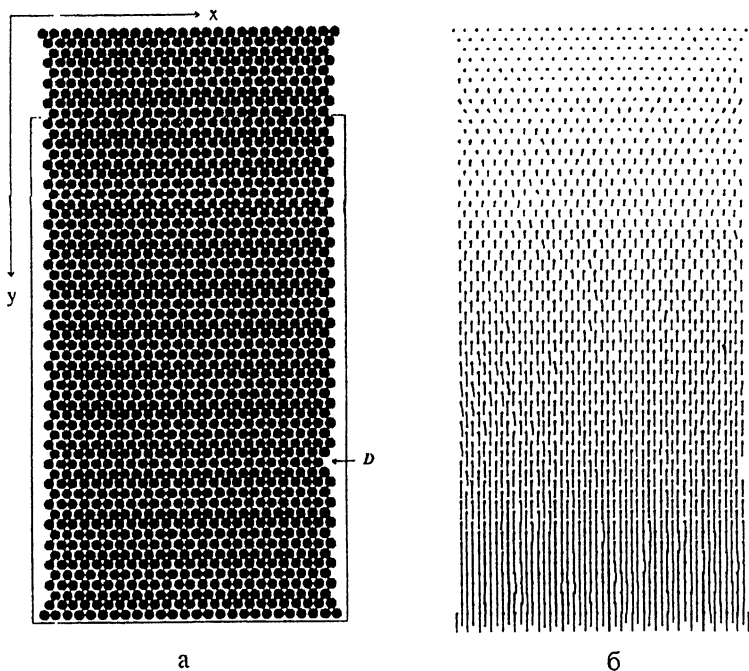
Взаимодействие между элементами рассматривается в парном приближении и определяется центральными силами, силами вязкого и сухого трения, а также силами сопротивления сдвиговой деформации. Для моделирования эволюции рассматриваемого материала численно решалась система уравнений движения

$$\begin{cases} m^i \frac{d^2 \mathbf{x}^i}{dt^2} = \sum_j \mathbf{F}^{ij}, \\ \hat{J}^i \frac{d^2 \theta^i}{dt^2} = \sum_j \mathbf{K}^{ij}, \end{cases}$$

где $\mathbf{F}^{ij} = (\mathbf{p}^{ij} + \mathbf{f}^{ij})$, $\mathbf{K}^{ij} = q^i (\mathbf{n}^{ij} \times \mathbf{F}^{ij})$, \mathbf{p}^{ij} описывает центральное взаимодействие, а \mathbf{f}^{ij} является тангенциальной составляющей силы взаимодействия. Единичный вектор \mathbf{n}^{ij} определяется как $\mathbf{n}^{ij} = (\mathbf{R}^j - \mathbf{R}^i)/r^{ij}$, r^{ij} — межэлементное расстояние, а q^i — расстояние от центра i -го элемента до точки контакта с j -м элементом.

В простейшем случае элемент (клеточный автомат) содержит материал только одного сорта (исходный компонент смеси или продукт реакции), а в общем случае — совокупность нескольких различных веществ, характеристики которых и будут определять его состояние. При описании свойств составного клеточного автомата используется аналог модели виртуального кристалла, согласно которой все удельные характеристики элемента и параметры взаимодействия с соседями определяются усреднением по количеству атомов составляющих его композиций. Таким образом, клеточный автомат может изменить свое состояние как в результате внутренних превращений, так и при химическом реагировании.

Использование описанного подхода позволило, в частности, провести анализ процесса установления стационарного режима деформации при динамическом нагружении. Для этого в работе моделировался образец, структура которого показана на рис. 1, а. Нагрузка прикладывалась к нижней части образца. Используемые параметры межэлементного взаимодействия соответствовали чистому Ni. Размер одного элемента составлял 4 мкм. Моделировался режим растяжения с постоянной скоростью V_y . Расчеты проводились для $V_y = 10$ см/с; $V_y = 1$ см/с и $V_y = 0.1$ см/с.

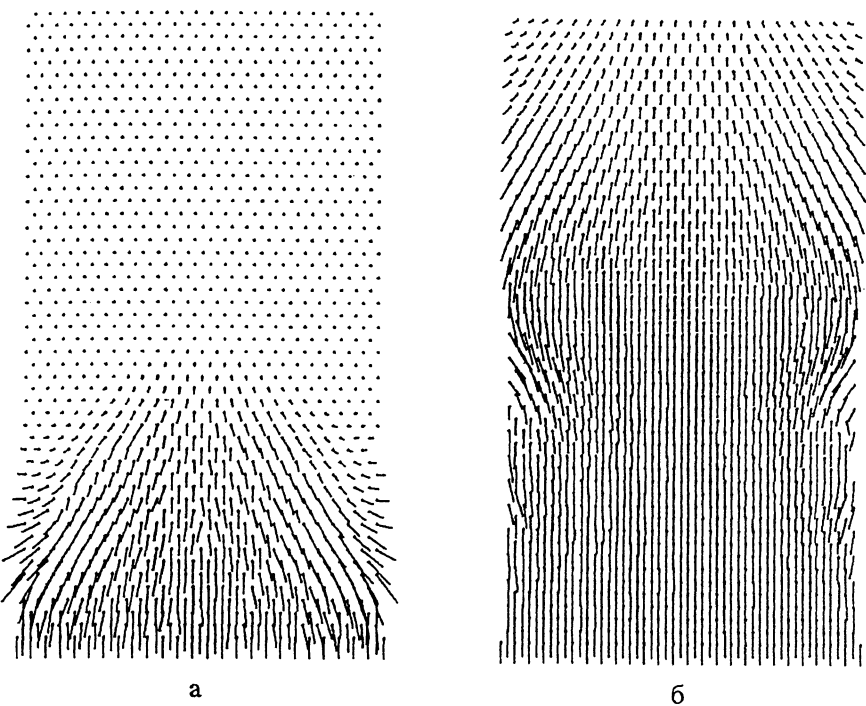


а

б

Рис. 1. Структура образца (а): размеры по оси X — 0.1 мм, по Y — 0.2 мм, D — поверхностный дефект; поле скоростей для $t = 5$ мкс и скорости нагружения $V_x = 10$ см/с (б).

Из анализа эволюции поля скоростей следует, что стационарный режим деформации устанавливается к моменту времени $t = 5$ мкс (рис. 1, б). Поэтому для изучения особенностей установления стационарного режима деформирования использовался более мелкий шаг по времени. Так, к моменту времени $t = 0.05$ мкс уже сформировался фронт установившейся деформации, показанный на рис. 2, а (на рис. 2 поля скоростей приведены для области, ограниченной прямоугольником на рис. 1, а). Этот момент соответствует началу движения фронта установления стационарного режима деформации. Как и следовало ожидать, для однородного образца он имеет плоскую форму. Из дальнейшей эволюции поля скоростей можно видеть, что за фронтом следует область сжимающих напряжений размером по оси $OY \approx 30$ мкм, что можно видеть из рис. 2, б. Данный импульс сжатия распространяется непосредственно за фронтом вплоть до установления стационарного режима деформирования.



а

б

Рис. 2. Поле скоростей при скорости нагружения $V_x = 10$ см/с, а — $t = 0.05$ мкс; б — $t = 0.35$ мкс.

Для исследования устойчивости обнаруженного импульса, в случае отклонения поверхности от идеальной, на одной из боковых сторон образца моделировался дефект (область D на рис. 1, а). Анализ результатов показал, что при всех рассмотренных скоростях нагружения обнаруженный эффект сохраняется и является устойчивым относительно взаимодействия с поверхностным дефектом.

В заключение следует отметить, что при взаимодействии с поверхностным дефектом внутренняя структура импульса изменяется. Таким образом, можно ожидать, что экспериментальное изучение обнаруженного эффекта может быть осуществлено на основе исследования соответствующих акусто-эмиссионных спектров.

Список литературы

- [1] Панин В.Е., Клименов В.А., Псагье С.Г. и др. Конструирование новых материалов и упрочняющих технологий. Новосибирск: Наука, 1993. 151 с.
- [2] Нестеренко В.Ф. Импульсное нагружение гетерогенных материалов. Новосибирск: Наука, 1993. 200 с.
- [3] Bruno M.S. // *Mechanics of Materials*. 1994. V. 18. N 1. P. 31-48.
- [4] Zhou M., Niedleman A. et al. // *J. Mech. Phys. Solids*. 1994. V. 42. N 3. P. 423-428.
- [5] Куксенко В.С., Слуцкер А.И., Школьник И.Э. // *Письма в ЖТФ*. 1993. Т. 19. В. 4. С. 65-70.
- [6] Псагье С.Г., Незрескул С.И., Зольников К.П. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука, 1995. С. 77-105.
- [7] Беркович С.Я. Клеточные автоматы как модель реальности: поиски новых представлений физических и информационных процессов. М.: Изд. МГУ, 1993. 182 с.

Поступило в Редакцию
22 июня 1995 г.
