

## Моделирование роста трещин в процессе разрушения гетерогенных материалов

© В.Л. Гиляров

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Vladimir.Hilarov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 16 июня 2010 г.

В окончательной редакции 30 августа 2010 г.)

Построена модель клеточного автомата для описания разрушения механически нагруженных гетерогенных материалов. Выявлены два предельных сценария процесса разрушения — дисперсионный (перколяционный), когда дефекты накапливаются однородно по объему материала, и коррелированный (рост преимущественно одного очага), наблюдающиеся в разрушении реальных материалов. Показано, что в случае коррелированного разрушения трещина растет по механизму выбрасывания парных перегибов своего фронта. В промежуточном случае процесс проходит оба этих сценария: сначала медленный накопительный (перколяционный), а затем быстрый коррелированный, к моменту начала которого формируется самоорганизованное критическое состояние с характерным для него степенным распределением трещин по размерам.

Клеточные автоматы (КА) часто используются в современной науке для моделирования эволюции нелинейных систем в различных областях знания — физике, химии, биологии, социологии, экономике. Причиной такого широкого применения КА является богатство упорядоченных и случайных структур, описываемых КА при очень простых правилах его работы. Так, в игре Конвея „Жизнь“, реализуются стационарные локализованные состояния, циклы различного периода, движущиеся, растущие, фрактальные структуры и т.д. [1]. В то же время для визуализации таких структур не нужен даже компьютер; достаточно располагать карандашом и бумагой в клетку. Значительное количество КА различной природы описано в [2]. В [3] сделана попытка построения синергетической картины мира, основанной на клеточных автоматах.

КА удобно применять для моделирования процессов в физике и механике разрушения, таких как выяснение характера накопления повреждений, зарождение и рост микротрещин, поведение пористых материалов под нагрузкой и др. Такие задачи с нарушениями сплошности значительно сложнее поддаются решению на языке дифференциальных уравнений. Заметим, что любому дифференциальному уравнению можно сопоставить КА; к этому по сути дела и сводится метод конечных разностей. Обратное вообще говоря, неверно, поскольку КА может быть определен на классе разрывных недифференцируемых функций.

Моделирование накопления повреждений в гетерогенных материалах под нагрузкой методом КА изучалось, например, в [4–6]. В последнее время интенсивно развивается метод подвижных клеточных автоматов [7,8], позволяющий наряду с изучением образования и эволюции несплошностей в материале учитывать эффекты пластической деформации. Основной задачей моделирования материалов под нагрузкой методом КА является

выявление универсальных характеристик поведения системы, независимых от деталей модели.

Формирование самоорганизованного критического состояния (СОКС) на конечной стадии процесса разрушения гетерогенных материалов (металлов и горных пород) было обнаружено в [9,10]. При приближении к СОКС меняется характер пространственных и временных корреляций в системе. Кроме того, для СОКС характерно степенное распределение дефектов по их размерам (соотношение число дефектов — их площадь) [11]. Построение КА модели такого поведения материалов изучается в настоящей работе.

Рассматривается двумерная модель накопления повреждений. Плоскость, в которой развивается разрушение, разбивается на квадратные клетки (элементы). Анализируемая далее система содержит  $100 \times 100$  элементов. (Исследовались также системы большего размера  $250 \times 250$  элементов с целью уменьшения влияния граничных эффектов. Качественных различий в поведении систем большего размера отмечено не было). Внешнее механическое напряжение приложено перпендикулярно этой плоскости. Гетерогенность материала учитывается заданием различных локальных напряжений на элементах по закону

$$\sigma_{ij} = \sigma_0 + \delta\sigma_{ij},$$

где  $\sigma_0$  — внешнее приложенное напряжение,  $\delta\sigma_{ij}$  — добавка к внешнему напряжению за счет неоднородности материала (например, разновидности проходных молекул в аморфной прослойке полимера или внутренних напряжений в зернах поликристалла), индексы  $i, j$  означают номер элемента. Элемент разрушается, если напряжение на нем превосходит критическую для материала величину ( $\sigma_{ij} \geq \sigma_{cr}$ ). Величины  $\delta\sigma_{ij}$  выбираются из гауссовского распределения с нулевым средним значением и заданной дисперсией  $\Delta$ . Такая постановка

задачи формально отличается от стандартно используемой, в которой задается распределение элементов по их разрывной прочности [12], а разрушение элемента происходит при достижении внешней нагрузкой прочности данного элемента; однако физически процесс в обоих случаях развивается одинаково. Более того, была решена задача для случая, когда элемент разрушается с заданной вероятностью на каждом шаге компьютерного эксперимента [4], и показано, что характер накопления повреждений от этого не зависит.

После разрушения элемента механические напряжения с него перераспределяются на соседние элементы по заданному закону. Выбор этой закономерности является в достаточной мере произвольным. Так, в [4] механические напряжения перераспределялись на ближайшие неразрушенные элементы. В моделях разрыва пучка волокон [12,13] при разрыве одного из волокон напряжения с него перераспределялись на все оставшиеся волокна. В настоящей работе механические напряжения перераспределяются на ближайшие элементы аналогично [4]. Однако в отличие от [4] решается двумерная, а не одномерная задача. Рассматривается два варианта релаксации напряжений. В первом случае напряжения на соседних с разрушенным элементах умножаются на заданный коэффициент  $a$ , который можно варьировать. Во втором случае предполагается, что механическое напряжение на элементе  $i$  и его ближайшем окружении остается неизменным при разрушении элемента, т.е.  $\sum_j \sigma_{ij} \{\text{before}\} = \sum_j \sigma_{ij} \{\text{after}\}$ .

Алгоритм расчета работает следующим образом. Определяются разрушенные в начальный момент времени элементы и рассчитывается релаксация напряжений. Формирование начальной структуры дефектов завершается, когда последовательные акты разрушения элементов на счет релаксации напряжений заканчиваются (возможны реализации, когда на этой стадии происходит разрушение структуры, в качестве которого принимается формирование соединяющего перколяционного кластера в одном из двух взаимно перпендикулярных направлений квадратной решетки). Предполагается, что разрушение структуры происходит по кинетическому механизму Журкова [14], поэтому на следующем временном шаге считается разрушенным элемент, на котором существуют максимальные механические напряжения. Вновь производится релаксация напряжений и т.д. до разрушения решеточной структуры.

На каждом шаге проводится многократная маркировка разрушенных кластеров методом Хошена–Копельмана [15] и рассчитывается число кластеров  $n_r$ , содержащих  $r$  элементов (распределение по размерам). Пример кинетики накопления кластеров, состоящих из разного числа элементов ( $r = 1-4$ ), приведен на рис. 1. По оси абсцисс отложено время в единицах машинного шага алгоритма. Видно, что формирование более крупных кластеров происходит с запаздыванием по времени, поскольку они формируются из более

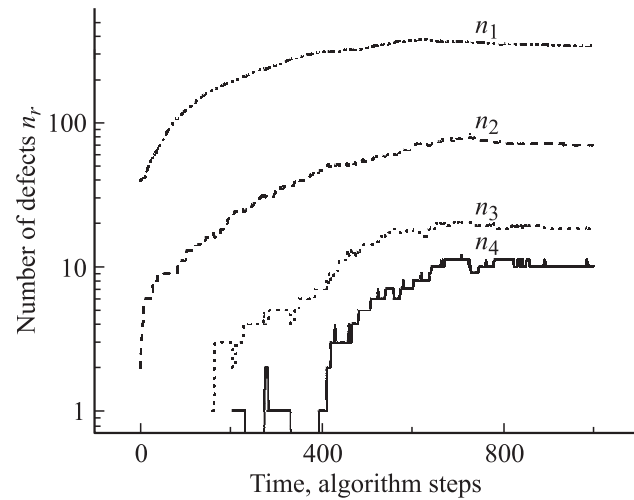
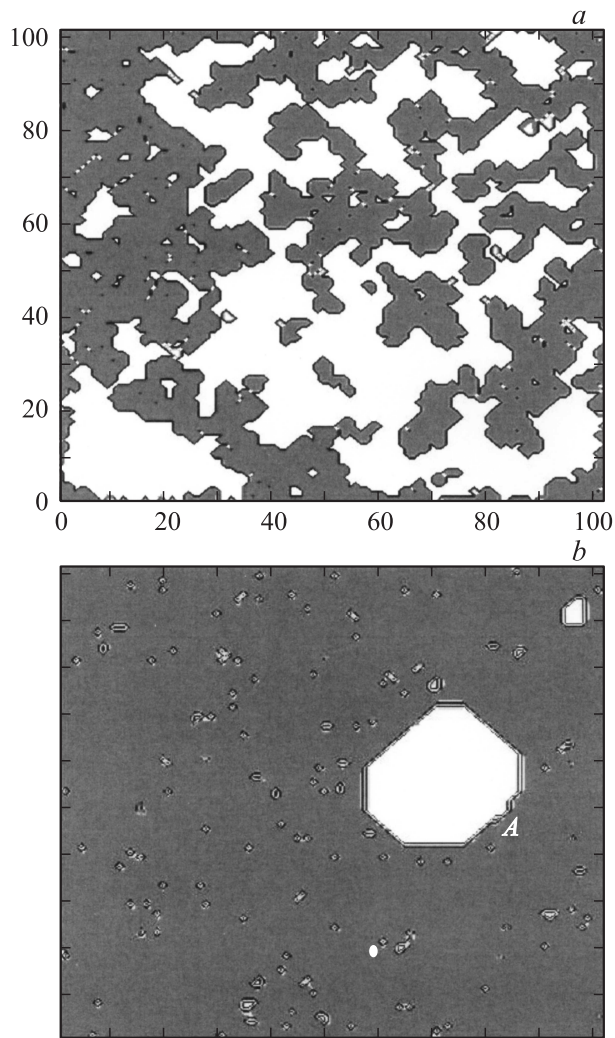


Рис. 1. Кинетические кривые накопления числа дефектов  $n_r$ , состоящих из разного числа разрушенных элементов ( $r = 1-4$ ).

мелких. Оказалось, что характер кинетики существенным образом зависит от закона перераспределения напряжений, а также от соотношения  $\sigma/\sigma_{cr}$  и степени неоднородности материала  $\Delta$ . Можно выделить два предельных случая. Если релаксация напряжений после разрыва элемента отсутствует, кинетика определяется чистой перколяцией. При этом распределение дефектов по размерам, как видно из рис. 1, со временем расширяется. Оно становится степенным при достижении порога перколяции. Структура дефектов вблизи порога перколяции приведена на рис. 2, *a*. Другой предельный случай реализуется, когда разрушение одного элемента приводит к значительным перенапряжениям на соседних с ним элементах, что в свою очередь приводит к их разрушению. В этом случае запускается цепная реакция, в результате которой растет преимущественно один очаг разрушения (функция распределения дефектов по размерам пропорциональна функции Дирака  $\delta(r)$ ). В остальных промежуточных случаях система эволюционирует к масштабно-инвариантному состоянию со степенным законом распределения дефектов по размерам (рис. 3). Данные на рис. 3 усреднены по 100 реализациям процесса. Это распределение имеет вид  $n \sim r^{-2}$  (соотношение число–площадь), характерное для СОКС ( $n$  — число кластеров, объединяющих  $r$  элементов). Процесс проходит, как и в натурном эксперименте [16], две стадии — накопительную некоррелированную, когда дефекты образуются практически однородно в рассматриваемой плоскости, и коррелированную — быстрый рост очага разрушения (режим с обострением [13]). Характерная структура растущей трещины в локализованной коррелированной стадии процесса приведена на рис. 2, *b*.

Аналогично влияют на кинетику и другие параметры задачи: степень гетерогенности  $\Delta$  и отношение  $\sigma/\sigma_{cr}$ . Увеличение гетерогенности  $\Delta$  или внешнего напряже-

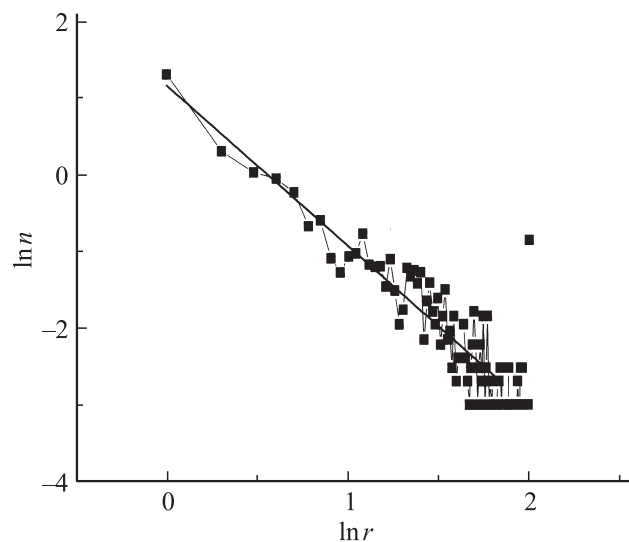


**Рис. 2.** Характерные виды повреждений в двух предельных случаях разрушения для системы, содержащей  $100 \times 100$  элементов. *a* — перколяционное разрушение, *b* — коррелированное разрушение. Светлые области соответствуют разрушенным элементам, темные — неразрушенным.

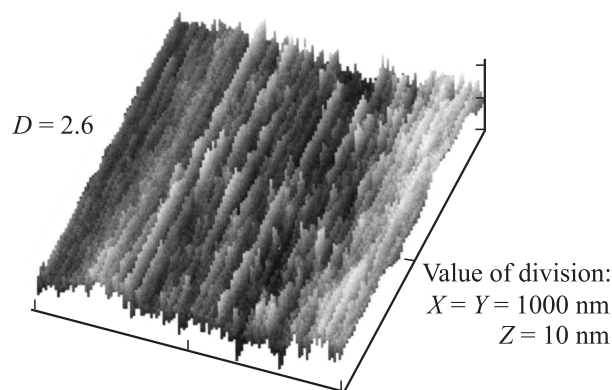
ния ( $\sigma/\sigma_{cr}$ ) приводит к увеличению числа точек роста очагов разрушения (множественное разрушение); наоборот, уменьшение этих величин приводит к большей локализации процесса разрушения (растет преимущественно один очаг).

В процессе компьютерного эксперимента делались мгновенные снимки структуры на каждом временном шаге, что позволяло наблюдать во времени за характером накопления повреждений и роста образующихся трещин (рис. 2). Было отмечено, что увеличение концентрации напряжений в вершине растущей трещины, аналогичному продвижению дислокации путем выбрасывания парного перегиба. Этот механизм роста трещины описан в [14,17], когда трещина прорастает в идеальной кристаллической решетке, однако в настоящей работе трещина растет в гетерогенном материале. Такой механизм роста трещины может порождать похожие на пе-

риодические структуры, наблюдавшиеся на поверхности разрушения аморфных сплавов [18]. Трещина в направлении своего распространения преодолевает потенциальные барьеры различной формы и высоты, что находит свое отражение во фрактальной структуре рельефа поверхности разрушения в этом направлении. В перпендикулярном направлении распространяются „парные перегибы“ за счет того, что значительные локальные напряжения, возникающие при выбрасывании перегибов, превышают прочность элементов структуры. На рис. 2, *b* вблизи позиции *A* на фронте трещины можно видеть небольшой перегиб, перемещающийся вдоль диагонали рисунка. Разрушение элементов приводит к прорастанию фронта трещины и снятию механических перенапряжений. Фрактальная размерность в этом направлении оказывается значительно ниже, чем в направлении роста трещины [18]. Экспериментальный профиль поверхности



**Рис. 3.** Степенное распределение дефектов по их размерам (числу элементов, из которых они состоят).



**Рис. 4.** Экспериментальный профиль поверхности разрушения аморфного сплава  $Fe_{77}Ni_1Si_9B_{13}$ , полученный методом зондовой микроскопии (СТМ) (по данным [18]). *D* — фрактальная размерность в направлении роста трещины.

разрушения сплава  $Fe_{77}Ni_1Si_9B_{13}$  приведен на рис. 4 [18]. Следует отметить, что этот профиль представляет собой трехметную структуру, в то время как рассматриваемая модель двумерна. Соответствие модели с экспериментом можно найти в том случае, если предположить, что парный перегиб образуется выходом из рассматриваемой плоскости. Именно в этом случае на поверхности разрушения будет образовываться наблюдаемая структура. Такой механизм роста трещины типичен для случая роста одиночного очага (рис. 2, *b*). В случае перколяционного роста трещины результирующая форма поверхности разрушения фрактальна в обоих направлениях (рис. 2, *a*).

Можно показать, что релаксация парных перегибов энергетически выгодна в упругой среде. Для выяснения этого факта были рассмотрены упругие энергии двух различных плоских дефектов. Первый из них представлял собой концентратор напряжений в виде объединения двух круговых пор в центре квадратного образца, размер которого в 10 раз превышал размер большой поры (для уменьшения влияния граничных эффектов). Радиусы пор различались в 10 раз. Центр маленькой поры находился на окружности большой и моделировал выбрасывание порой парного перегиба. На границе образца параллельных линии, соединяющей центры пор, задавалось одноосное смещение по нормали к границе образца, а две другие границы образца (перпендикулярные линии, соединяющей центры пор) оставались свободными. Второй дефект представлял собой эквивалентную окружность той же площади, что и первый, с такими же граничными условиями. Эта конфигурация была выбрана из соображений постоянства поверхностной энергии дефектов в обоих случаях. Постановка задачи аналогична классической задаче Гриффитса о равновесии твердого тела с трещиной, однако в настоящей работе рассмотрена двумерная геометрия и проведен численный расчет. Методом конечных элементов рассчитана упругая энергия обеих конфигураций и показано, что конфигурация с одной окружностью является энергетически более выгодной, чем с двумя, т.е. при флуктуационном образовании парного перегиба на окружности круговой поры ему энергетически выгодно распространяться на всю поверхность дефекта. Этот результат совпадает с тем, что демонстрирует поведение клеточного автомата в случае, близком к однородному, — рост преимущественно одной трещины по механизму выбрасывания парных перегибов. В противоположном предельном случае перколяционного роста очагов разрушения (сильная гетерогенность, отсутствие релаксации напряжений, большое внешнее напряжение), как уже отмечалось, клеточный автомат предсказывает множественное разрушение с образованием двумерной фрактальной структуры.

Таким образом, рассмотрено поведение клеточного автомата, моделирующего разрушение гетерогенных материалов. Выявлено два предельных случая с существенно разным типом накопления повреждений; оба они реализуются при реальном разрушении материалов. Опи-

сана зависимость характера разрушения от параметров задачи (степени гетерогенности материала, величины внешнего напряжения, характера релаксации внутренних напряжений). Обнаружена степенная зависимость числа образовавшихся в процессе разрушения дефектов от их размера, отражающая механизм формирования СОКС на заключительной стадии разрушения. Появление степенной зависимости дефектов по размерам в процессе квазистатического разрушения является прогностическим признаком приближающейся катастрофы (разрушения материала).

Автор выражает благодарность А.И. Слуцкеру за ряд ценных замечаний.

## Список литературы

- [1] С.П. Курдюмов, Г.Г. Малинецкий, А.Б. Потапов, А.А. Самарский. В. сб.: Компьютеры и нелинейные явления / Под ред. А.А. Самарского. Наука. М. (1988). С. 5.
- [2] S. Wolfram. A new kind of science. Wolfram media (2002). 1280 p.
- [3] С.Я. Беркович. Клеточные автоматы как модель реальности: поиски новых представлений и информационных процессов. Изд-во МГУ, М. (1993). 112 с.
- [4] Е.Е. Дамаскинская, Н.Г. Томилин. ФТТ **33**, 278 (1991).
- [5] S. Nishiuma, S. Miyazima. Physica A **278**, 3–4, 295 (2000).
- [6] Д.В. Алексеев, Г.А. Казунина. ФТТ **48**, 255 (2006).
- [7] С.Г. Псахье, С.Ю. Коростелев, А.Ю. Смолин, А.И. Дмитриев, Е.В. Шилько, Д.Д. Моисеенко, Е.М. Татаринцев, С.В. Алексеев. Физ. мезомеханика **1**, 95 (1998).
- [8] С.Г. Псахье, Г.П. Остермайер, А.И. Дмитриев, Е.В. Шилько, А.Ю. Смолин, С.Ю. Коростелев. Физ. мезомеханика **3**, 5 (2000).
- [9] В.Л. Гиляров. ФТТ **36**, 2247 (1994).
- [10] В.Л. Гиляров. ФТТ **47**, 808 (2005).
- [11] D.L. Turcotte. Rep. Prog. Phys. **62**, 1377 (1999).
- [12] J.V. Andersen, D. Sornette, K.-T. Leung. Phys. Rev. Lett. **78**, 2140 (1997).
- [13] А.В. Подлазов. Режимы с обострением с комплексными показателями. Лог-периодические колебания в модели разрыва пучка волокон. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша № 35 (2009). 22 с.
- [14] В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский. Кинетическая природа прочности твердых тел. Наука. М. (1974). 560 с.
- [15] Х. Гулд, Я. Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. Мир, М. (1990). 399 с.
- [16] D.A. Lockner, J.D. Byerlee, V. Kuksenko, A. Ponomarev, A. Sidarin. Nature **350**, 39 (1991).
- [17] А.Н. Орлов. Введение в теорию дефектов в кристаллах. Высш. шк., М. (1983).
- [18] В.И. Бетехтин, В.Л. Гиляров, А.Г. Кадомцев, В.Е. Корсуков, М.М. Корсукова, Б.А. Обидов. Изв. РАН. Сер. физ. **73**, 1507 (2009).