

01;05

Описание перехода твердое тело–жидкость в методе частиц

© G.-P. Ostermeyer, В.Л. Попов

TU Berlin, Institut für Mechanik, Sekr. C8, Straße des 17. Juni 135,
D-10623 Berlin, Germany

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 11 октября 1999 г.

Методы мезочастиц показали себя в последние годы эффективным средством дискретизации и моделирования механического поведения различных систем. Принципиальным недостатком этих методов является, однако, невозможность описания систем с различной, в особенности малой поперечной жесткостью. В настоящей работе показано, что эту трудность можно преодолеть, если использовать вместо двухчастичных потенциалов взаимодействия многочастичные потенциалы. Исходя из двухчастичного потенциала Леннарда–Джонса найдена явная форма многочастичного (зависящего от температуры) потенциала, позволяющего описывать системы с произвольной (вплоть до нулевой) поперечной жесткостью с сохранением всех известных преимуществ метода частиц. Предлагается также форма многочастичной диссипативной функции, удовлетворяющей общим свойствам симметрии.

В работе [1] была обоснована необходимость совместного рассмотрения термодинамических и механических свойств твердых тел. При приближении к точке плавления модуль сдвига многих материалов существенно уменьшается, а в точке плавления обращается в нуль, в результате чего тело теряет свою механическую устойчивость по отношению к сдвиговым напряжениям. Описание систем с существенно изменяющимся модулем сдвига, а также сред с нулевым модулем сдвига должно быть поэтому важным требованием к любому методу описания упругопластических тел, в том числе и к методам частиц.

В настоящей работе обсуждается вопрос, каким образом указанное уменьшение поперечной жесткости вблизи точки плавления и сам переход твердое тело–жидкость могли бы быть описаны в рамках метода мезочастиц. В этом методе среда разбивается на отдельные частицы, потенциал взаимодействия между которыми выбирается таким образом,

чтобы удовлетворить макроскопическим свойствам среды (упругие модули и т.д.). Эволюция системы под действием внешних сил описывается классическими уравнениями движения, что сближает метод частиц с методом молекулярной динамики. Вместе с тем совместное описание механических и термодинамических свойств среды подразумевает, что потенциал взаимодействия должен зависеть от температуры, которая рассматривается как один из параметров, характеризующих каждую частицу.

Попытка описания взаимодействия между термодинамическими и механическими степенями свободы была предпринята в работе Остермайера [2]. Он предложил использовать потенциал взаимодействия

$$V = V_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

притягивающая часть которого обращается в нуль при критической температуре T_c . В (1) V_0 и r_0 есть соответственно глубина потенциальной ямы и равновесное расстояние между частицами при нулевой температуре.

Хотя такой подход и позволяет описать процесс плавления подогреваемого снизу образца со свободными гранями, а также процесс экструзии [2], он может рассматриваться только как первый шаг к совместному термомеханическому описанию мезочастичных систем. Необходимость дальнейшего развития метода обусловлена следующими основными причинами:

1. Равновесное расстояние между частицами с потенциалом взаимодействия (1) стремится к бесконечности как $r = r_0(1 - T/T_c)^{-1/2}$ при приближении температуры к критическому значению. Мы, таким образом, имеем дело, скорее, с переходом твердое тело–газ, чем твердое тело–жидкость.

2. С другой стороны, при наличии внешнего давления P система с потенциалом (1) будет находиться в кристаллическом состоянии при любой температуре, даже выше критической. Модуль сдвига будет при этом пропорционален $P^{14/13}$, т.е. примерно пропорционален внешнему давлению.

Оба этих свойства противоречат феноменологическим свойствам перехода жидкость–твердое тело. Легко показать, что преодолеть эти

трудности в рамках двухчастичных потенциалов взаимодействия принципиально невозможно.

В настоящей работе мы предлагаем новую формулировку метода мезочастиц, позволяющую избежать указанных трудностей. Мы начнем наше рассмотрение с описания жидкого состояния, поскольку наибольшие проблемы в методе мезочастиц возникают именно при попытках описания жидкостей.

Многочастичный потенциал взаимодействия. Будем исходить из основного феноменологического свойства жидкой среды — зависимости ее потенциальной энергии только от плотности среды. Любые движения, не изменяющие плотности жидкости, не приводят к изменению ее потенциальной энергии и не связаны поэтому с возникновением возвращающих сил. Это свойство как раз и означает "текучесть" среды.

Вместе с тем следует принять во внимание, что упругие свойства жидкости по отношению к всестороннему растяжению и сжатию остаются практически неизменными по сравнению с твердым состоянием. Именно это свойство принципиально отличает жидкое состояние от газообразного. Необходимо, таким образом, найти такой потенциал взаимодействия, который бы обеспечивал тот же упругий модуль сжатия, что и в твердом теле, но приводил бы к нулевому модулю сдвига.

Для этой цели исходим из твердого состояния системы частиц, описываемых двухчастичным потенциалом

$$V = V_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]. \quad (2)$$

Представим потенциальную энергию такой системы в равновесном состоянии как функцию плотности частиц n . Принимая во внимание, что при изменении расстояний между частицами без изменения характера их упаковки плотность двумерной системы $n \propto r^{-2}$, а трехмерной $n \propto r^{-3}$, и обозначая равновесную плотность через n_0 , найдем

$$V = AV_0 \left[\left(\frac{n}{n_0} \right)^6 - 2 \left(\frac{n}{n_0} \right)^3 \right], \quad D = 2, \quad (3)$$

$$V = AV_0 \left[\left(\frac{n}{n_0} \right)^4 - 2 \left(\frac{n}{n_0} \right)^2 \right], \quad D = 3, \quad (4)$$

где A есть не зависящая от плотности константа. Она может быть найдена путем суммирования потенциала (2) по всем частицам системы и сравнения результата с (3), (4). Ввиду быстрого убывания потенциала (2) с расстоянием допустимо ограничиться рассмотрением взаимодействия только ближайших соседей (пренебрежение взаимодействием с более удаленными частицами приведет к ошибке порядка 1.5%). В названном приближении

$$A = \frac{1}{2}NZ, \quad (5)$$

где N есть полное число атомов в системе, а Z — координационное число плотной упаковки ($Z = 6$ для двумерной и $Z = 12$ для трехмерной системы). В дальнейшем для конкретности мы рассматриваем только двумерные системы; трехмерные системы могут быть рассмотрены аналогично.

Потенциальная энергия в расчете на один атом равна

$$V^* = \frac{Z}{2}V_0 \left[\left(\frac{n}{n_0} \right)^6 - 2 \left(\frac{n}{n_0} \right)^3 \right], \quad D = 2. \quad (6)$$

Решающий шаг в построении искомого потенциала состоит в том, что мы рассматриваем выражение (6) как новое определение потенциальной энергии системы. Для неоднородной системы определим полную потенциальную энергию системы как сумму выражений (6) по всем частицам:

$$V = \sum_i V^*(n^{(i)}), \quad (7)$$

где $V^*(n^{(i)})$ дается по определению уравнением (6) с $Z = 6$, а $n^{(i)}$ есть подходящим образом определенная "плотность" частиц в точке $r^{(i)}$ — координате i -й частицы.

Очевидно, что при однородных сжатии и растяжении система частиц, описываемая потенциалом (7), по определению проявляет те же упругие свойства, что и твердое тело с потенциальной энергией, определяемой уравнением (3). В то же время движения, не изменяющие локальной плотности частиц, не изменяют потенциальную энергию. Тем самым в рамках метода частиц с новым потенциалом взаимодействия оказываются выполненными два основных феноменологических свойства жидкости.

Определим локальную плотность среды в точке $r^{(i)}$ с помощью весовой функции K , существенно убывающей на расстоянии $R_0 > r_0$ (практическое применение метода показывает, что уже выбор $R_0 \approx 2r_0$ достаточен для практических целей):

$$n^{(i)} \equiv n(r^{(i)}) \equiv \sum_{j \neq i} K(|r^{(i)} - r^{(j)}|). \quad (8)$$

Весовая функция K должна быть нормирована таким образом, чтобы в равновесной конфигурации системы с потенциалом (2) выражение (8) давало бы равновесную плотность n_0 .

Отметим, что использование весовой функции, сглаживающей структуру жидкости на расстояниях порядка нескольких межатомных расстояний, сближает предлагаемый метод с так называемым методом нечетких частиц (smooth particles), разработанным Lucy [3] и Monaghan [4] в 1977 г. Приложения метода нечетких частиц к гидродинамическим задачам могут быть найдены, например, в [5]. Метод нечетких частиц не позволяет, однако, рассматривать среды с переменной поперечной жесткостью и тем более переход твердое тело–жидкость, что является основной целью и преимуществом излагаемого нами метода.

Сила, действующая на i -й атом со стороны всех окружающих атомов, дается уравнением

$$\begin{aligned} F^{(i)} &= - \frac{\partial V}{\partial r^{(i)}} \\ &= - \sum_{j \neq i} \left(\frac{\partial V^*(n^{(i)})}{\partial n^{(i)}} + \frac{\partial V^*(n^{(j)})}{\partial n^{(j)}} \right) \cdot \frac{\partial K}{\partial r} \Big|_{r=|r^{(i)}-r^{(j)}|} \cdot \frac{r^{(i)} - r^{(j)}}{|r^{(i)} - r^{(j)}|}. \end{aligned} \quad (9)$$

Многочастичный потенциал (7) был введен нами таким образом, чтобы упругие свойства жидкости по отношению к всестороннему сжатию или растяжению были бы теми же самыми, что и у соответствующего твердого тела. Различие между системой с многочастичным потенциалом (7) и двухчастичным потенциалом (2) состоит только в поперечной жесткости системы: двухчастичный потенциал описывает твердое тело, в то время как многочастичный потенциал — жидкость. Введение "смешанного" потенциала

$$V_{tot} = \alpha V_{two} + \beta V_{many} \quad (\alpha + \beta = 1) \quad (10)$$

позволяет описать системы с различной степенью поперечной жесткости (вплоть до нулевой в жидком состоянии при $\alpha = 0$).

Если бы плавление представляло собой переход второго рода (это возможно, однако, только в изолированных точках диаграммы равновесия $P-V$ [6]), то модуль сдвига μ обращался бы в нуль как $\mu \propto (T - T_c)$ [1]. Соответственно потенциал (10) в окрестности точки плавления мог бы быть записан в виде

$$V_{tot} = (T/T_c - 1)V + (T/T_c)V^*. \quad (11)$$

В случае реальных переходов первого рода изменение состоит только в том, что коэффициенты α и β будут функциями температуры, обращающимися в точке перехода соответственно в 0 и 1 скачком. В случае системы с неоднородным распределением температуры обобщение (11) очевидно:

$$V_{tot} = \sum_i \left[(T^{(i)}/T_c - 1) \sum_{j \neq i} V(r_{ji}) + (T^{(i)}/T_c)V^*(r^{(i)}) \right]. \quad (12)$$

Диссипация энергии. Принципиальное различие между методом молекулярной динамики и методом мезочастиц состоит в том, что мезочастицы являются носителями термодинамических свойств, таких как температура. Важным становится поэтому рассмотрение диссипации энергии в системе квазичастиц. Метод введения диссипации энергии был рассмотрен в [2] на примере систем с одной степенью свободы. В многочастичной системе диссипация, однако, не может быть введена для каждой пары частиц и, вообще говоря, зависит от коррелированного движения многих соседних частиц. Общие условия, которым должна удовлетворять любая диссипативная функция, могут быть получены уже из соображений симметрии. Так, диссипативная функция должна обращаться в нуль при любом движении системы как целого. С другой стороны, диссипация должна исчезать вместе с исчезновением взаимодействия между частицами, даже если имеет место их относительное движение. Оба этих условия могут быть удовлетворены, если представить диссипативную функцию в виде произведения потенциала на данной частоте и функции от соответствующим образом определенного "тензора скорости деформации" в данной точке (последний автоматически обращается в нуль при любом поступательном или вращательном движении системы как целого).

Для вывода искомой формы диссипативной функции рассмотрим систему частиц, конфигурация которых в момент времени t определяется набором координат $[r^{(i)}]$, а в момент времени $t' = t + \Delta t$ — набором $[r'^{(i)} = r^{(i)} + u^{(i)}]$. Поставим вопрос об определении оптимальной локальной аппроксимации этого движения в окрестности i -й частицы движением, эквивалентным однородной деформации системы. При однородной деформации, характеризуемой тензором деформации ε_{km} , смещения частиц были бы равны

$$(\tilde{u}^{(j)} - \tilde{u}^{(i)})_k = \varepsilon_{km}(r^{(j)} - r^{(i)})_m. \quad (13)$$

Действительные движения отличаются от (13) на величину

$$\left[(u^{(j)} - u^{(i)})_k - (\tilde{u}^{(j)} - \tilde{u}^{(i)})_k \right] = \left[(u^{(j)} - u^{(i)})_k - \varepsilon_{km}(r^{(j)} - r^{(i)})_m \right].$$

Определим ε_{km} , минимизирующий сумму квадратов этих отклонений с весовой функцией $\Phi(r)$, т. е. величину

$$\Delta = \sum_{j \neq i, k, m} \Phi(|r^{(i)} - r^{(j)}|) \cdot \left[(u^{(j)} - u^{(i)})_k - \varepsilon_{km}(r^{(j)} - r^{(i)})_m \right]^2. \quad (14)$$

Условие минимума имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta}{\partial \varepsilon_{km}} &= \sum_{j \neq i} \Phi(|r^{(i)} - r^{(j)}|) \\ &\times \left[(u^{(j)} - u^{(i)})_k - \varepsilon_{km}(r^{(j)} - r^{(i)})_m \right]^2 \cdot (r^{(j)} - r^{(i)})_m = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Отсюда

$$\varepsilon_{km}^{(i)} = \frac{\sum_{j \neq i} \Phi(|r^{(i)} - r^{(j)}|) \cdot (u^{(j)} - u^{(i)})_k \cdot (r^{(j)} - r^{(i)})_m}{\sum_{j \neq i} \Phi(|r^{(i)} - r^{(j)}|) \cdot (r^{(j)} - r^{(i)})_m^2}. \quad (16)$$

Диссипативная функция на i -й частице, определяющая скорость перехода механической энергии в тепловую энергию, может быть теперь с учетом высказанных выше методологических принципов определена как

$$D^{(i)} = V^{(i)} \left\{ \eta \left(\dot{\varepsilon}_{mm} - \frac{1}{3} \delta_{mn} \dot{\varepsilon}_{ll} \right)^2 + \frac{\zeta}{2} \dot{\varepsilon}_{ll}^2 \right\}, \quad (17)$$

где δ_{nm} есть символ Кронекера, а η, ζ есть феноменологические (положительные) коэффициенты, описывающие вязкость среды (они,

однако, не имеют размерности вязкости). Форма, стоящая в фигурных скобках, есть наиболее общая форма квадратичной скалярной функции симметричного тензора второго ранга в изотропной среде [7].

Полная диссипативная функция среды дается выражением

$$D = \sum_i D^{(i)}. \quad (18)$$

Уравнения движения могут быть записаны как

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{r}^{(i)}} \right) - \frac{\partial L}{\partial r^{(i)}} + \frac{\partial D}{\partial \dot{r}^{(i)}} = 0, \quad (19)$$

$$\frac{d}{dt} T^{(i)} = \frac{1}{c^{(i)}} \dot{r}^{(i)} \frac{\partial D}{\partial \dot{r}^{(i)}} \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\dot{r}^{(i)} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}^{(i)}} - L + c^{(i)} \cdot T^{(i)} \right) = 0, \quad (20)$$

где $c^{(i)}$ есть теплоемкость i -й частицы, а $L = K - V_{tot}$ есть функция Лагранжа системы, причем $K = \sum_i \frac{m^{(i)} \dot{r}^{(i)2}}{2}$ есть кинетическая, а V_{tot} — потенциальная энергия, определяемая уравнением (12). Изменения температуры, обусловленные теплопроводностью, могут быть рассмотрены аналогично тому, как это было сделано в работе [2].

Тем самым мы приходим к замкнутой системе механических и термодинамических уравнений, описывающих механику как твердых, так и жидких сред, а также их взаимные превращения. Примеры приложений данного метода к описанию таких процессов, как плавление, пластическая деформация и разрушение, экструзия, спекание, трение и износ, будут представлены в отдельной статье.

Авторы благодарны Deutsche Forschungsgemeinschaft SFB 605 за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] Попов В.Л. // Письма в ЖТФ. 1999.
- [2] Ostermeyer G.-P. // ZAMM. 1999 (in press).
- [3] Lucy L.B. // Astron. J. 1977. V. 82. P. 1013.
- [4] Monaghan J.J. // Ann. Rev. Astron. Astrophys. 1992. V. 30. P. 543.
- [5] Kum O., Hoover W.G., Porsch H. // Phys. Rev. E. 1995. V. 35. P. 4899.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976.
- [7] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987.