

07,10

Моделирование акустической эмиссии и разрушения поликристаллических гетерогенных материалов методом дискретных элементов

© В.Л. Гиляров, Е.Е. Дамаскинская

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

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

Поступила в Редакцию 21 февраля 2022 г.

В окончательной редакции 21 февраля 2022 г.

Принята к публикации 24 февраля 2022 г.

Метод дискретных элементов применен для выявления особенностей разрушения материалов разной степени гетерогенности. Показано, что он адекватно описывает основные свойства материалов при их механическом разрушении, такие как хрупкое и пластическое поведение, двухстадийный характер разрушения гетерогенных материалов, неоднородность пространственного распределения локальных внутренних напряжений в зависимости от степени гетерогенности.

Ключевые слова: метод дискретных элементов, прочность гетерогенных материалов, компьютерное моделирование.

DOI: 10.21883/FTT.2022.06.52394.295

1. Введение

Проблема разрушения конструкционных, строительных и природных материалов была и остается актуальной в связи с происходящими техногенными и природными катастрофами. При этом важно понимать, что разрушение не является неким критическим событием, которое может быть предотвращено использованием материалов с запасом по прочности или геометрическим размерам, заведомо способных выдержать заданные механические нагрузки. Напротив, разрушение представляет собой развивающийся в пространстве и времени процесс [1], в ходе которого параметры материалов, такие как модули упругости, локальные механические напряжения и деформации, перестройки структуры и нарушения сплошности могут претерпевать значительные изменения. Этот процесс может сопровождаться различного рода излучениями (акустическая и электронная эмиссия, механолюминисценция), параметры которых могут служить индикаторами или предвестниками различного рода событий в процессе разрушения.

Традиционные континуальные методы расчета прочностных характеристик (например, метод конечных элементов) по определению не позволяют явно учесть разрушение материала (нарушение сплошности). Вместо этого рассматривается некая эффективная среда, в которой разрушение моделируется заданным феноменологически уравнением состояния (как правило, нелинейным), содержащим критерий разрушения материала. В отличие от этих методов, используемый в настоящей работе метод дискретных элементов (DEM), позволяет явно учитывать локальные нарушения сплошности в процессе разрушения.

В настоящей работе была использована модель сферических частиц (моделирующих зерна поликристалла), соединенных связями (моделирующими межзеренные границы) в местах контактов частиц. Данная модель (bonded particle model — BPM) подробно описана в [2], ее различные модификации широко применяются для изучения поведения материалов при механическом разрушении (например, [3–8]). В модели BPM зарождение трещин определяется разрывом связей между частицами, а их распространение — слиянием множества разорванных связей [9].

Целью настоящей работы было изучение влияния степени гетерогенности материалов на характер разрушения и акустической эмиссии, сопровождающей процесс разрушения. Элементарным актом акустической эмиссии считался разрыв одиночной связи. Расчеты производились в свободно распространяемом пакете программ MUSEN [10].

2. Описание численного эксперимента

Моделировались образцы цилиндрической формы диаметром 10 и высотой 20 mm. Размеры были подобраны таким образом, чтобы была возможность сравнить результаты, полученные моделированием, с результатами лабораторных экспериментов, полученных ранее на образцах таких же размеров. Цилиндры заполнялись сферическими частицами одного или разных размеров и упаковывались генератором упаковки MUSEM до достижения пористости 0.35–0.37. При этом перекрытие соприкасающихся сфер не превышало 0.0001 mm.

Таблица 1. Параметры материалов, использованные при моделировании

№	Материал	ρ , kg/m ³	E , GPa	ν	σ_n , МПа	σ_t , МПа	η , Pa · s
1	Гранит	2700	45	0.13	175	175	5E19
2	Кварц	2650	94	0.29	600	600	5E19
3	Ортоклаз	2560	62	0.29	420	420	1E19
4	Олигоклаз	2560	70	0.29	480	480	1E19
5	Стекло	2500	50	0.22	50	50	1E40
6	Связь кварц-ортоклаз	2500	5.8	0.2	200	200	5E19
7	Связь кварц-олигоклаз	2500	5.8	0.2	300	300	5E19
8	Связь ортоклаз-олигоклаз	2500	5.8	0.2	100	100	5E19

Примечание. Здесь: ρ — плотность материала, E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона, σ_n — прочность материала на разрыв, σ_t — прочность материала на сдвиг, η — динамическая вязкость.

Таблица 2. Диаметры зерен (mm) и процентный состав каждой из фракций

	Диаметр зерен различных фракций d_i , mm					Доля каждой фракции, %
	0.36	0.188	0.52	0.28	0.42	
Кварц	0.36	0.188	0.52	0.28	0.42	0.0595745
Ортоклаз	0.27	0.28	0.4	0.36	0.26	0.0702128
Олигоклаз	0.16	0.168	0.288	0.24	0.4	0.0702128

Таблица 3. Диаметры зерен (mm) и процентный состав каждой из фракций

	Диаметр зерен различных фракций d_i , mm					Доля каждой фракции, %
	0.09	0.047	0.132	0.079	0.106	
Кварц	0.09	0.047	0.132	0.079	0.106	0.0595745
Ортоклаз	0.068	0.07	0.096	0.91	0.064	0.0702128
Олигоклаз	0.041	0.042	0.077	0.063	0.098	0.0702128

В качестве материалов, из которых состояли сферические зерна и связи между ними (межзеренные границы), использовались материалы с параметрами, приведенными в табл. 1. Эти параметры задавались характерными для горных пород. Следует отметить, что „микроскопические“ значения параметров для частиц и связей отличаются от реальных значений параметров материала в целом, поэтому для сопоставления величин механических свойств модельных материалов с реальными необходима калибровка „микроскопических“ параметров [2,11]. Поскольку в данной работе не ставилась задача сопоставлений численных значений величин для модельных и реальных материалов (например, их прочности), такая калибровка параметров не проводилась.

Использовались три типа образцов разной степени гетерогенности:

1. Однородный образец из зерен (частиц) и связей со свойствами гранита (табл. 1). Размер частиц 0.4 mm, их число 28125.

2. Зерна (частицы) с диаметрами и процентным составом, указанными в табл. 2 (диаметр частиц в миллиметрах, их число 48695). Размеры представляют собой набор величин со средним значением 0.3 mm и стандартным отклонением 0.1 mm, полученный генератором случайных чисел с нормальным распределением.

3. Зерна (частицы) с диаметрами и процентным составом, указаны в табл. 3 (диаметр частиц в миллиметрах, их число 33670). Указанные размеры представляют собой набор величин со средним значением 0.08 mm и стандартным отклонением 0.025 mm, полученный генератором случайных чисел с нормальным распределением. Диаметр фракции 4 для ортоклаза увеличен на порядок для повышения степени гетерогенности.

Связи формировались в местах контактов частиц. Материал связей выбирался из табл. 1. Частицы из одного материала соединялись связью из того же материала, а частицы из разных материалов соединялись либо низкопрочными хрупкими стеклянными связями 4 (далее — набор связей типа 1), либо низко модульными связями

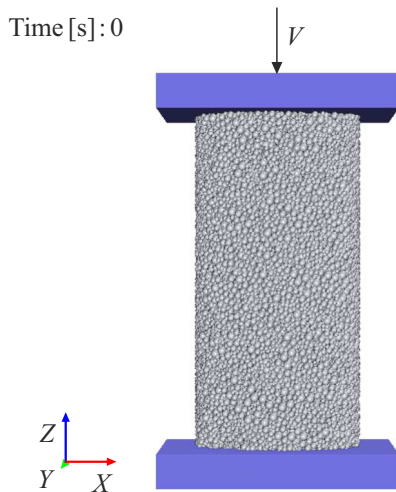


Рис. 1. Образец и схема модельного эксперимента.

ми 6, 7, 8 [12] (далее — набор связей типа 2). Диаметр связей (d) выбирался генератором связей автоматически равным меньшему диаметру пары соединяемых частиц 1 и 2: $d = \min\{d_1, d_2\}$ [10]. Максимальная длина связей (L_{\max}) выбиралась таким образом, чтобы между парой соединяемых частиц не могла поместиться еще одна частица. Минимальная длина L_{\min} обычно была нулевой. Следует отметить, что при таком выборе L_{\min} система может самопроизвольно взрываться, поскольку допускалось перекрытие частиц, отмеченное выше. Если это происходило, то минимальная длина связи принималась равной максимальному перекрытию (0.0001 mm) с обратным знаком.

Далее образец помещался в виртуальный пресс, в котором нижняя плита была неподвижна, а верхняя перемещалась в направлении нижней со скоростью $V = 0.02 \text{ m/s}$ до тех пор, пока образец не разрушался (рис. 1). В процессе разрушения через равные промежут-

ки времени — интервал времени сохранения данных — записывался большой набор различных механических параметров образца, который может быть использован для дальнейшего анализа.

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 2 приведены диаграммы нагружения образцов разной гетерогенности и однородного образца. Деформация рассчитывалась по формуле $\varepsilon = Vt$. Напряжения рассчитывались, исходя из сил, действующих на нагружающие плиты. Поскольку в численном эксперименте невозможно в общем случае выдержать равенство сил, действующих на плиты [13], напряжение рассчитывалось по формуле $\sigma = 0.5(F_t + F_b)/S$, где индексы t и b означают верх и низ, S — сечение образца (использовалось сечение в начальный момент времени).

Видно, что для более гомогенных образцов (1 и 2 рис. 2, *a* и рис. 2, *b*) характерно хрупкое поведение (линейное увеличение напряжения) и резкое спадание напряжений после достижения максимального значения. Для более гетерогенных образцов (кривые 3–5, рис. 2, *a*) характерно наличие нелинейного (пластичного) участка на диаграмме нагружения. Это связано с тем, что сначала рвутся более слабые связи, а уж затем более прочные.

Модель позволяет также изучить кинетику разрыва связей во времени. Результаты приведены на рис. 3 и представляют собой число связей, разорванных за интервал времени сохранения данных (10^{-5} s для рис. 3, *a* и 10^{-4} s для рис. 3, *b* и 3, *c*) — „акустической активности“ (АА).

На рис. 3 хорошо видна разница в поведении „акустической активности“ для гомогенных и гетерогенных материалов. Для первых (рис. 3, *a, b*) характерно очень небольшое число разорванных связей вплоть до момента разрушения, когда достигается максимальное значение

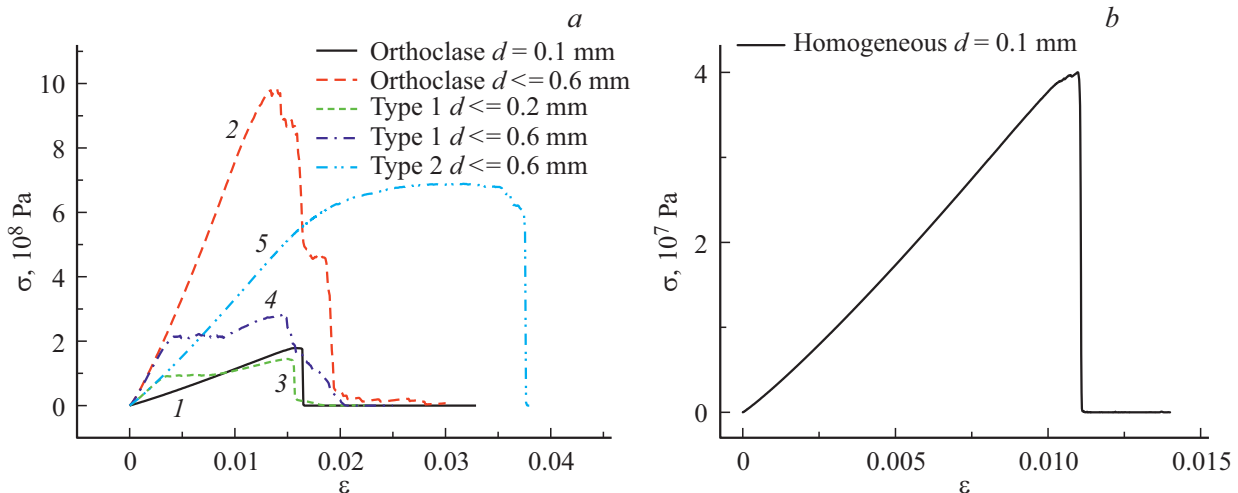


Рис. 2. Диаграммы нагружения образцов с разным типом связей (*a*) и однородного образца (*b*).

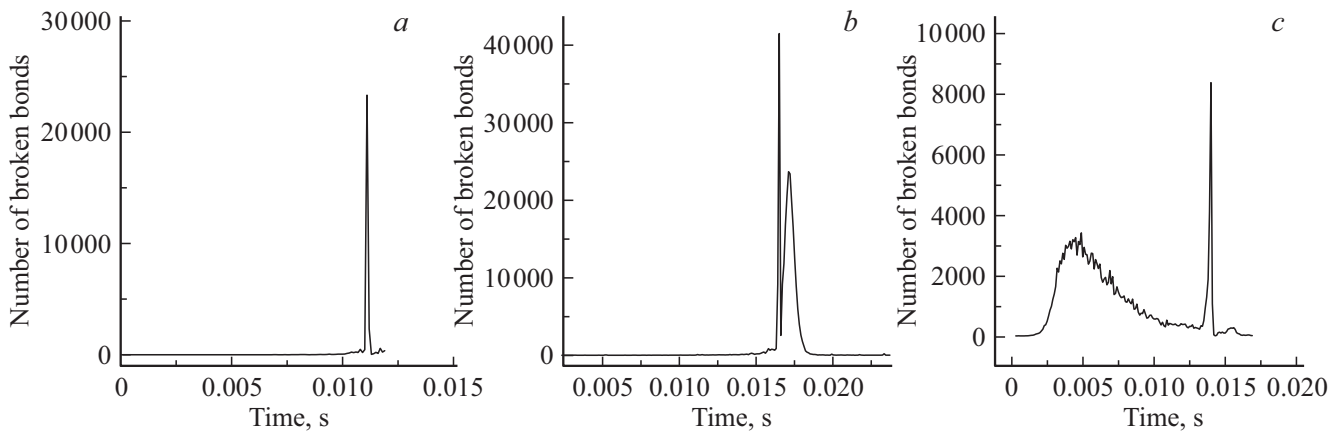


Рис. 3. „Акустическая активность“ — число связей, разорванных за единицу времени в однородном образце (a); образце с одним типом связей (ортоклаз) (b) и образце с разными связями (типа 1). Диаметр связей $d = 0.1$ mm.

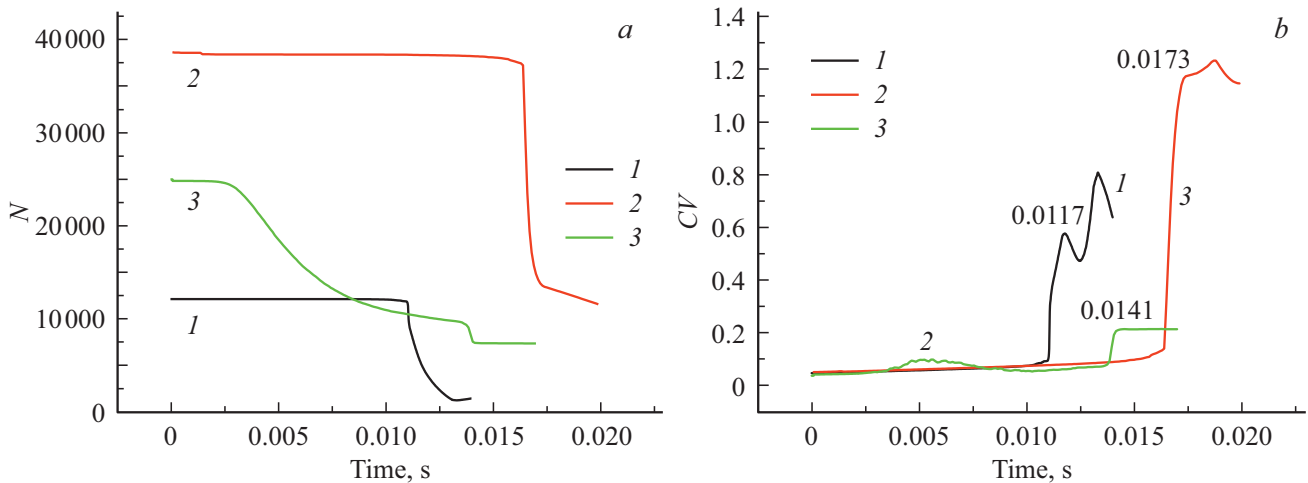


Рис. 4. Зависимость от времени числа целых связей усредненных по слоям (N) (a) и коэффициента вариации (CV): 1 — однородный образец, 2 — образец с ортоклазовыми связями, 3 — образец со связями типа 1 из табл. 1.

напряжений на рис. 2. В этот момент происходит всплеск АА. В гетерогенном образце накопление разрывов связей начинается в пластической области, когда начинают разрушаться наиболее слабые связи. Отметим, что основное влияние на механические свойства моделируемых в настоящей работе материалов оказывают гетерогенность и механические свойства межзеренных границ (связей), в то время как свойства зерен (частиц) существенной роли не играют. Это связано с тем, что разрушение самих частиц в рассматриваемой модели не происходит.

Анализ неоднородности разрыва связей по объему образца приведен на рис. 4. Образец разбивался на 10 слоев по высоте, и параметры разрушения рассчитывались в каждом слое для каждого сохраненного момента времени. На рис. 4, a приведена зависимость от времени числа целых связей усредненных по слоям (N) для трех рассматриваемых образцов. В качестве меры пространственной неоднородности был выбран коэффи-

циент вариации числа целых связей по слоям (CV). Его временная зависимость приведена на рис. 4, b.

Для образцов 1 и 2 наблюдается хрупкое разрушение: незначительное уменьшение числа целых связей с низким коэффициентом вариации (однородность и объем) в течение длительного времени симуляции и взрывоподобный скачок CV вблизи времени разрушения образца (локализация разрушения и прорастание трещины). Для гетерогенного образца 3 происходит накопление повреждений при значительно меньших временах. Однако коэффициент вариации на этой стадии также небольшой, что говорит о том, что повреждения накапливаются более или менее однородно по объему образца. Это подтверждает справедливость модели двухстадийного разрушения гетерогенных материалов, предложенную в [14,15]. Скачок коэффициента вариации также не очень велик. Это соответствует обнаруженному ранее в лабораторных экспериментах однородному характеру разрушения в гетерогенных образцах [16], а

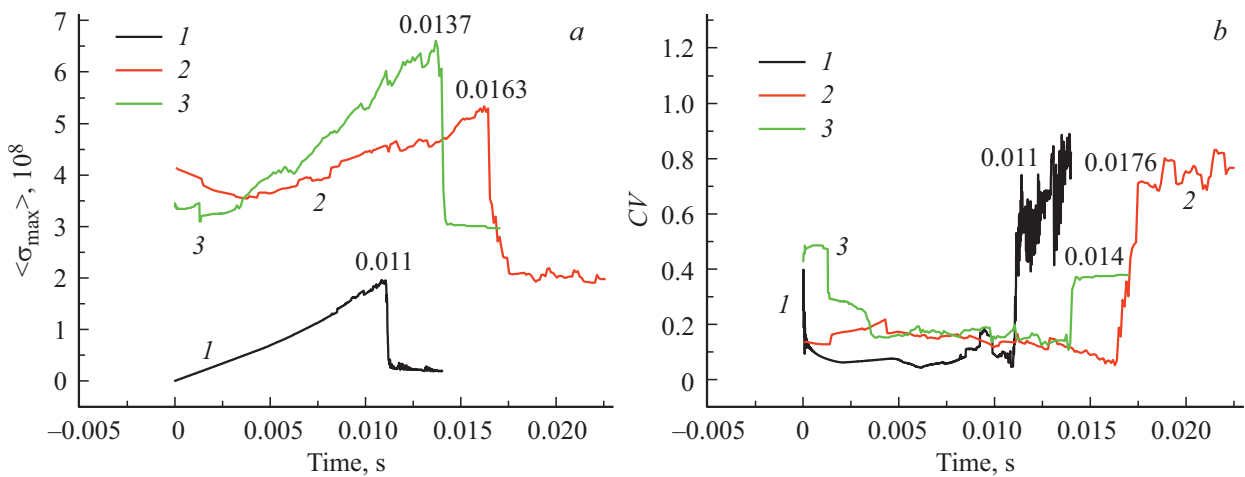


Рис. 5. Усредненные по слоям максимальные растягивающие напряжения (а) и их коэффициенты вариации (б): 1 — однородный образец, 2 — образец с ортоклазовыми связями, 3 — образец со связями типа 1 из табл. 1.

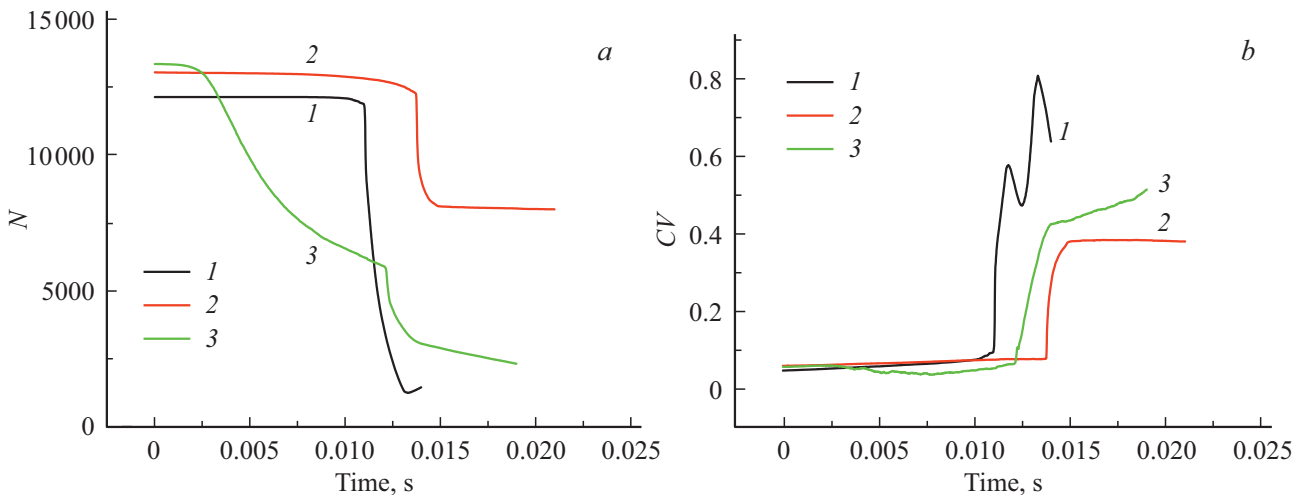


Рис. 6. Кинетика разрыва связей и ее коэффициент вариации для образцов с параметрами частиц из табл. 3. 1 — однородный образец, 2 — образец с ортоклазовыми связями, 3 — образец со связями типа 1 из табл. 1.

также аналогичному результату, полученному в модели клеточного автомата [17].

В каждом слое рассчитывались максимальные растягивающие напряжения на связях σ_{\max} . На рис. 5, а приведены зависимости от времени, усредненных по слоям, значений $\langle \sigma_{\max} \rangle$. Причины появления локальных растягивающих напряжений при действии внешнего сжимающего напряжения, хорошо известны (см., например, [2]) и здесь не обсуждаются. Эти напряжения получены усреднением по слоям максимальных напряжений в каждом слое в каждый сохраненный момент времени. На рис. 5, б приведены зависимости от времени коэффициента вариации по слоям величины σ_{\max} .

Для того чтобы понять поведение во времени растягивающих напряжений, нужно иметь в виду, что структура зерен и их границ (частиц и связей), созданная на стадии формирования материала, не является равновесной и содержит значительные внутренние локальные напря-

жения. На начальной стадии механического нагружения происходит релаксация этих напряжений. Это проявляется в немонотонности их временной зависимости на этой стадии (рис. 5, а) и значительном коэффициенте вариации на рис. 5, б. По мере релаксации напряжений они выравниваются по объему (рис. 5, б) и увеличиваются (рис. 5, а) до тех пор, пока не сформируются условия образования очага разрушения. При образовании очага локальные напряжения вновь становятся существенно неоднородными по объему (рис. 5, б), причем у гетерогенного образца величина этой неоднородности меньше, чем у более гомогенных.

Для выявления влияния гетерогенности распределения размеров зерен были изучены образцы, в которых размер зерна одной из ортоклазовых фракций был увеличен на порядок (0.91–0.091 mm) по сравнению с его значением, полученным генератором случайных чисел с нормальным распределением (табл. 3). Остальные

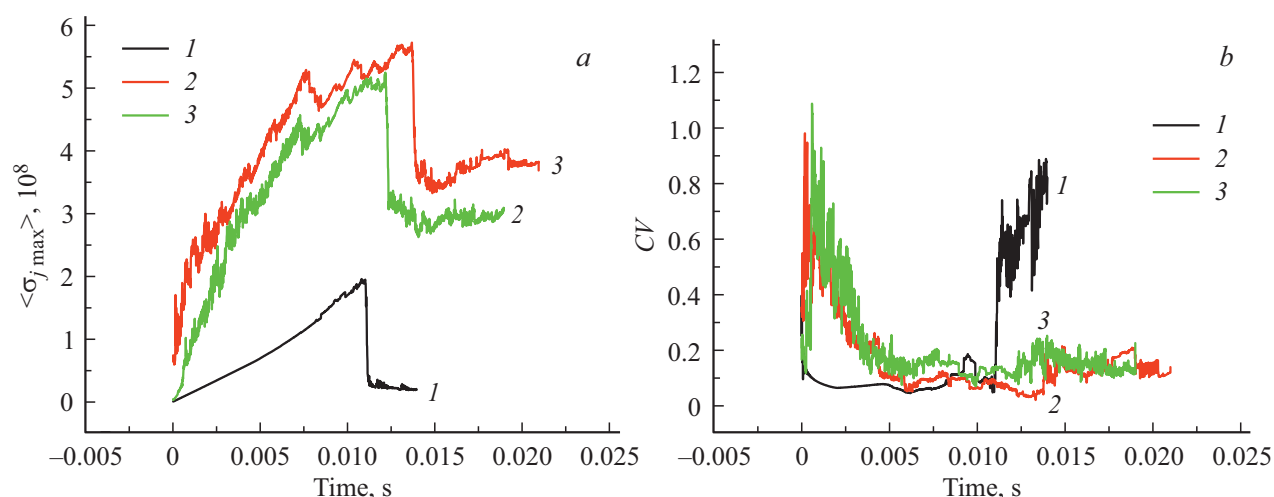


Рис. 7. Максимальные растягивающие напряжения и их коэффициенты вариации для образцов с параметрами частиц из табл. 3. 1 — однородный образец, 2 — образец с ортоклазовыми связями, 3 — образец со связями типа 1 из табл. 1.

параметры оставались такими же, как и для образцов, рассмотренных выше. Однородный образец в этой и предыдущей серии один и тот же.

На рис. 6 представлена кинетика разрыва связей и ее коэффициент вариации, аналогичные рис. 4, а на рис. 7 — максимальные напряжения и их коэффициенты вариации, аналогичные рис. 5.

Видно, что результаты по кинетике разрыва связей в этой серии (рис. 6) аналогичны тем, что приведены на рис. 4. Увеличение гетерогенности распределения размеров частиц привело к значительному уменьшению коэффициента вариации для образца с ортоклазовыми связями на последней (очаговой) стадии разрушения. То же произошло и с коэффициентом вариации локальных напряжений для этого образца. Таким образом, дополнительное увеличение гетерогенности образца привело к увеличению степени однородности характера его разрушения: многоочаговости.

4. Заключение

Представляется, что рассмотренная модель поликристаллических материалов реалистично описывает некоторые особенности их разрушения в тех случаях, когда основные процессы протекают по границам зерен. К таким особенностям относится хрупкий характер разрушения гомогенных материалов и наличие нелинейной упругости (пластичности) для более гетерогенных материалов, выявленные при помощи диаграммы нагружения сигма—эпсилон (уравнения состояния) и поведения во времени „акустической активности“ — числа разорванных связей за единицу времени. Для гетерогенных материалов модель предсказывает двухстадийный характер их разрушения, когда на первой стадии происходит накопление дефектов однородно по образцу, а на второй стадии — формирование и рост очага разрушения.

Расчет максимальных локальных напряжений показал, что гомогенность материала приводит к большей неоднородности локальных напряжений в пространстве, и наоборот, гетерогенность способствует большей их однородности. Такое же поведение локальных внутренних напряжений, рассчитанных на основании кинетической концепции С.Н. Журкова, было отмечено в лабораторных экспериментах в работе [16].

Мы предполагаем, что дальнейшие компьютерные эксперименты и их анализ позволят сопоставить распределение эволюционирующих в процессе разрушения дефектов по размерам и энергетическое распределение сигналов акустической эмиссии. Это позволит выяснить, при каких условиях происходит переход от марковского процесса к состоянию самоорганизованной критичности.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S.N. Zhurkov. *J. Fracture Mech.* **1**, 311 (1965).
- [2] D.O. Potyondy, P.A. Cundall. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **41**, 1329 (2004).
- [3] J.F. Hazzard, R.P. Young. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **37**, 867 (2000).
- [4] H. Hofmann, T. Babadagli, G. Zimmermann. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **77**, 152 (2015).
- [5] Harsh B. Vora, Julia K. Morgan. *J. Geophys. Res.: Solid Earth.* **124**, 7993 (2019).
- [6] N. Cho, C.D. Martin, D.C. Sego. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **44**, 7, 997 (2007).
- [7] J.F. Hazzard, R.P. Young. *Tectonophys.* **356**, 1–3, 181 (2002).
- [8] X.P. Zhang, L.N.Y. Wong. *Rock Mech. Rock Eng.* **45**, 5, 711 (2012).
- [9] A. Lisjak, G. Grasselli. *J. Rock Mech. Geotech. Eng.* **6**, 301 (2014).

- [10] M. Dosta, V. Skorych. Software **X12**, 100618 (2020).
- [11] T. Kazerani, J. Zhao. Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech. **34**, 18, 1877 (2010).
- [12] X.F. Li, Q.B. Zhang, H.B. Li, J. Zhao. Rock Mech. Rock Eng. **51**, 3785 (2018).
- [13] N.J. Brown. Discrete Element Modelling of Cementitious Materials. Ph.D. Thesis. The University of Edinburgh (2013). 247 p.
- [14] С.Н. Журков, В.С. Куксенко. Механика полимеров **10**, 5, 792 (1974).
- [15] V. Kuksenko, N. Tomilin, E. Damaskinskaya, D. Lockner. Pure Appl. Geophys. **146**, 253 (1996).
- [16] В.Л. Гиляров, Е.Е. Дамаскинская. ФТТ **63**, 6, 783 (2021).
- [17] В.Л. Гиляров. ФТТ **53**, 4, 707 (2011).

Редактор Т.Н. Василевская