

14,08

Особенности эволюции дефектной структуры в модели дискретных элементов

© Е.Е. Дамаскинская, В.Л. Гиляров

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

E-mail: Kat.Dama@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 19 октября 2023 г.

В окончательной редакции 12 ноября 2023 г.

Принята к публикации 13 ноября 2023 г.

Построена модель разрушения гетерогенного материала, основанная на методе дискретных элементов, которая помогает детально изучить эволюцию дефектов и сопровождающую их образование акустическую эмиссию. Показано, что анализ вида функции распределения амплитуд акустических событий позволяет определить момент времени, когда происходит переход системы дефектов в состояние самоорганизованной критичности.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод дискретных элементов, эволюция дефектов, распределения событий акустической эмиссии.

DOI: 10.61011/FTT.2024.01.56950.233

1. Введение

В большом числе экспериментов по деформированию природных гетерогенных материалов было обнаружено, что накопление дефектов характеризуется наличием нескольких стадий [1–8]. В начале нагружения происходит образование дефектов, распределенных случайным образом по всему объему деформируемого материала. Затем наблюдается локализация дефектообразования в определенной пространственной области, являющейся зоной формирования очага разрушения.

Для прогнозирования развития процесса разрушения и оценки степени критичности состояния деформированных материалов необходимо понять физические механизмы, управляющие образованием дефектов, и причины, вызывающие качественный переход от стадии дисперсного (стабильного) накопления повреждений к критической (или опасной) стадии. Ряд исследований посвящен поиску критериев перехода от стадии накопления случайных дефектов к стадии формирования очага разрушения [2,9–13].

Нами было показано, что распределение сигналов акустической эмиссии (АЕ) по энергии не всегда описывается соотношением Гуттенберга–Рихтера, т.е. не всегда удается аппроксимировать степенной функцией. Установлено [14], что на этапе хаотичного накопления дефектов распределение сигналов АЕ по энергии аппроксимируется экспоненциальной функцией, в то время как на стадии локализации (формирования очага) распределение сигналов АЕ по энергии становится степенным. Мы полагаем, что этот факт является отражением качественного изменения в механизме образования дефектов: перехода от Марковского процесса к состоянию самоорганизованной критичности.

Физические механизмы перехода от одной стадии разрушения к другой и факторы, влияющие на него, по-прежнему остаются неясными. Одна из причин связана со сложностью получения надежных экспериментальных данных о параметрах дефектов, которые необходимо детектировать в объеме материала непосредственно во время нагружения. Даже современный уровень развития рентгеновской компьютерной томографии не позволяет достичь необходимого пространственного разрешения и, что особенно важно, проводить исследования образца непосредственно в процессе деформирования.

В связи с этим, мы решили обратиться к компьютерному моделированию, предполагая, что численные эксперименты позволят более детально разобраться в данном вопросе.

Большинство ранее предложенных компьютерных моделей (например, [15]), используемых для описания механического поведения гетерогенных материалов, основаны на представлениях механики сплошных сред, которые не позволяют явно учесть образование дефекта (нарушение сплошности).

Однако для понимания физических закономерностей образования и эволюции дефектов (трещин), наиболее адекватными являются модели, основанные на методе дискретных элементов (DEM) [16,17]. Модель дискретных элементов позволяет явно учитывать локальные нарушения сплошности в процессе деформирования, естественным образом имитируя образование и развитие трещин.

В предыдущей работе [18] была предложена модель, которая адекватно описывает некоторые особенности разрушения гетерогенных материалов в тех случаях, когда основные процессы протекают по границам зерен.

Таблица 1. Параметры материалов, использованные при моделировании

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

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

Таблица 2. Диаметры зерен (mm) и процентный состав каждой из фракций (образцы 1 и 2)

Материал	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

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

Материал	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	0.0702127

В частности, воспроизведены реалистичные диаграммы нагружения, отражающие уравнения состояния для хрупких и пластичных материалов.

В настоящей работе с помощью этой же модели изучается эволюция дефектов на основе пространственного расположения связей, разорванных в различные моменты времени при деформировании образца.

2. Описание компьютерного эксперимента

Схема компьютерного эксперимента аналогична, изложенной в работе [18]. Моделировались образцы цилиндрической формы диаметром 10 mm и высотой (h) 20 mm. Образец помещался в виртуальный пресс. Нижняя плита была неподвижна, а верхняя перемещалась вниз с постоянной скоростью $v = 0.02$ m/s. Тем самым имитировалось одноосное сжатие.

Мы использовали модель связанных частиц (bonded particle model — ВРМ), которая подробно описана в [19]. Различные модификации этой модели применяются для изучения поведения материалов при механическом разрушении. Модель материала (горной породы) — сферические частицы одного или разных размеров, которые имитируют зерна, и связи между частицами, которые

имитируют межзеренные границы. В модели ВРМ зарождение трещин определяется разрывом связей между частицами, а их распространение — слиянием множества разорванных связей. Для того, чтобы получить трещину из набора связей, разорвавшихся от начала эксперимента до определенного времени, необходима процедура кластеризации. Таким образом, под дефектами в данной работе понимаются кластеры разорванных связей. Физико-механические параметры материалов, из которых состоят частицы и связи, приведены в табл. 1.

Модельные эксперименты выполнялись в свободно распространяемом пакете программ MUSEN [20].

Численные эксперименты проводились с тремя типами образцов.

Образец 1 состоит из частиц с диаметрами и процентным составом, указанными в табл. 2 (число частиц 33670). Эти 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. Все связи были только ортоклазовые диаметром 0.04 mm.

Образец 2 имеет такой же состав частиц, что и образец 1. Отличие состоит в материале связей: частицы из одного материала соединялись связью из того же

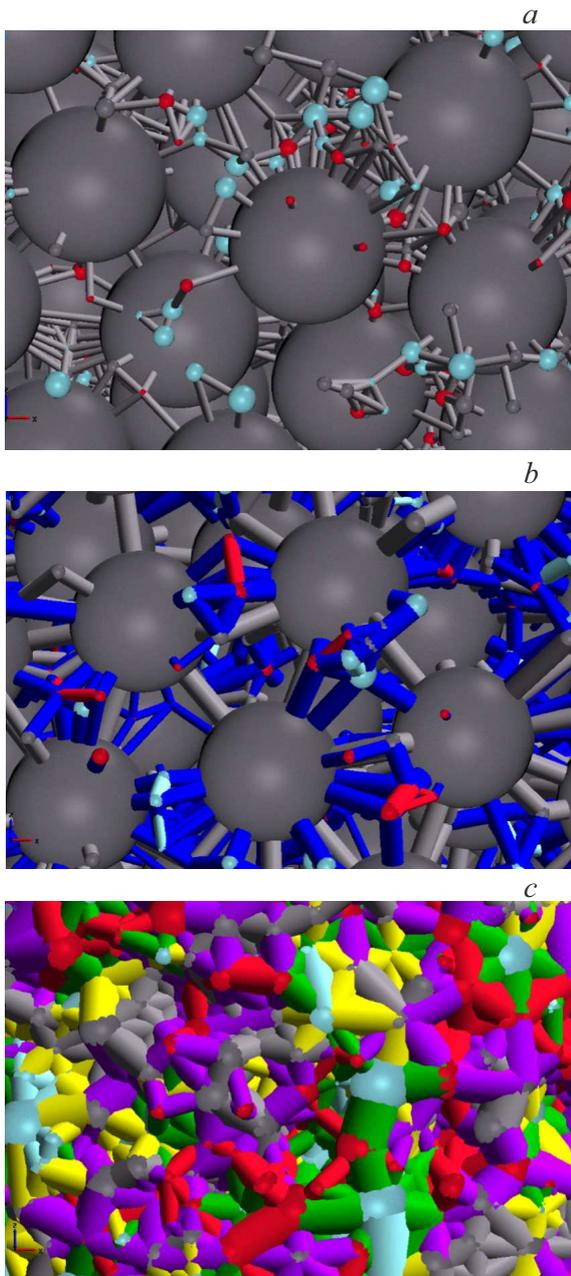


Рис. 1. Структура модельных образцов: *a* — образец 1 (все частицы соединены ортоклазовыми связями); *b* — образец 2 (частицы из разных материалов соединены стеклянными связями); *c* — образец 3 (частицы из разных материалов соединены низко модульными связями.) Ортоклаз — серый; олигоклаз — красный; кварц — голубой; стекло — синий; связь ортоклаз-олигоклаз — фиолетовый; связь кварц-ортоклаз — желтый; связь кварц-олигоклаз — зеленый.

материала, а частицы из разных материалов соединялись стеклянными связями с диаметрами $d \leq 0.1$ mm.

Образец 3 содержит частицы с диаметрами и процентным составом, указанными в табл. 3 (число частиц 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. Частицы из одного материала соединялись связью из того же материала, а частицы из разных материалов соединялись низко модульными связями 4–6 (табл. 1) с диаметрами $d \leq 0.6$ mm.

Схематично фрагменты структуры образцов показаны на рис. 1. Различные материалы показаны разным цветом. Сферы — частицы, цилиндры — связи.

Таким образом, образец 1 является более однородным, образец 2 подобен материалу с хрупкими межзеренными границами низкой прочности (стеклянные связи); образец 3 является существенно гетерогенным по предельной прочности связей, их диаметрам, а также содержит низко модульные связи, способные к упругому деформированию.

Эксперимент заканчивался, когда образец разрушался (разделялся на части). В процессе эксперимента через равные промежутки времени — интервал сохранения данных — записывался большой набор механических параметров, который использовался для дальнейшего анализа. Этот интервал времени выбирался, исходя из условия стационарности процесса на его протяжении. В настоящей работе такими параметрами были координаты центров связей, разорванных в процессе деформирования образца, и времена разрыва этих связей.

Диаграммы нагружения образцов приведены на рис. 2. Деформация рассчитывалась по формуле $\varepsilon = (v \times t)/h$. Напряжения рассчитывались, исходя из сил, действующих на нагружающие плиты по правилу, описанному ранее в [18]. На рис. 2 вторая горизонтальная ось соответствует времени эксперимента, что будет использовано при дальнейшем анализе результатов.

Напряжение на образце 1 изменяется практически линейно до максимального значения. Этот образец демонстрирует хрупкое поведение. Диаграмма нагружения образца 2, содержащего низкопрочные стеклянные связи, является нелинейной. В интервале времени $t \approx 0.003–0.006$ s изменяется угол наклона графика. При деформировании образца 3 наблюдается линейное возрастание напряжения, а затем практически горизонтальный участок.

Для исследования эволюции дефектов и дальнейшего сопоставления с акустоэмиссионными данными лабораторных экспериментов по деформированию природных гетерогенных материалов была проведена кластеризация центров разорванных связей. Использовался алгоритм DBSCAN (Density-based spatial clustering of applications with noise [21]), который выполняет кластеризацию на основе плотности составляющих кластер объектов. Алгоритм DBSCAN рассматривает кластеры как области с высокой плотностью, разделенные областями с низкой плотностью. В алгоритме есть два параметра, min_samples и eps , которые формально определяют, что мы имеем в виду, говоря о плотности. Более высокие min_samples или более низкие eps указывают на более высокую плотность, необходимую для формирования

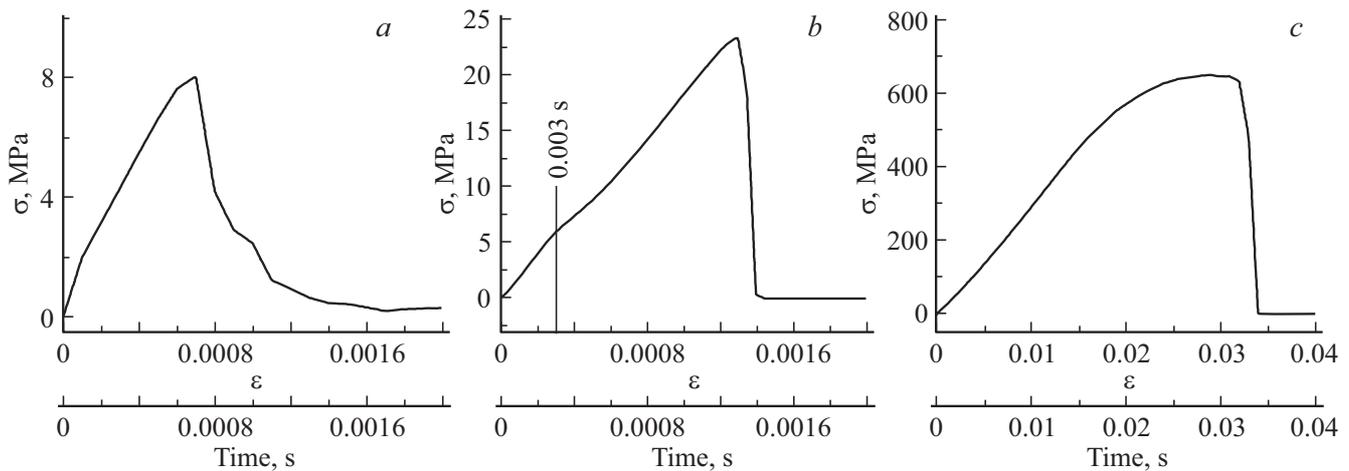


Рис. 2. Изменение напряжения в процессе компьютерного эксперимента: *a* — образец 1; *b* — образец 2; *c* — образец 3.

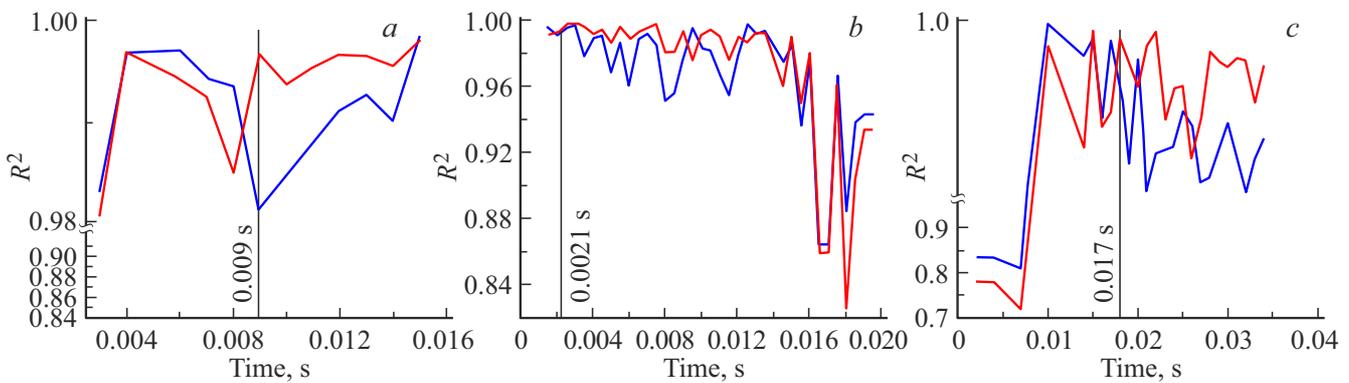


Рис. 3. Изменение коэффициента детерминации (R^2) в процессе деформирования образцов: *a* — образец 1, *b* — образец 2, *c* — образец 3. Синяя линия — R^2 при аппроксимации экспоненциальной функцией, красная линия — R^2 при аппроксимации степенной функцией. Вертикальные линии отмечают момент времени, когда происходит изменение функции распределения амплитуд событий акустической эмиссии.

кластера. Параметр `min_samples` — минимальный размер кластера; параметр `eps` — пространственный порог, т. е. максимальное расстояние между центрами разорванных связей, при котором допустимо объединение в кластер. В нашем случае, `min_samples = 2`, `eps = 0.4 mm`. Такие параметры были подобраны путем прямого сопоставления результатов кластеризации с визуально наблюдаемыми кластерами. Была разработана компьютерная программа, реализующая кластеризацию центров разорванных связей, на основе метода DBSCAN.

Кластеризация связей, разорвавшихся, от начала нагружения до момента времени t_k , позволяет получить картину дефектов, которые образовались к моменту t_k . При этом размер дефекта принимается равным числу связей, объединенных в данный кластер.

Кластеризация связей, разорвавшихся в течение определенного временного промежутка ($t_k; t_k + \Delta t$), позволяет получить аналог акустической эмиссии: каждый кластер можно рассматривать как событие акустической эмиссии, амплитуда которого равна размеру кластера.

3. Результаты компьютерного эксперимента и их обсуждение

Для выявления стадий процесса разрушения проводился анализ распределений событий акустической эмиссии по амплитуде. Процесс разбивался на последовательные временные интервалы, размер которых выбирался, как было отмечено выше, исходя из условия стационарности процесса внутри каждого интервала. Распределения, полученные на каждом временном промежутке, аппроксимировались экспоненциальной и степенной функциями, поскольку именно эти функции характерны для Марковского процесса и для состояния самоорганизованной критичности. Для каждой аппроксимации вычислялся коэффициент детерминации R^2 . На рис. 3 показано изменение коэффициента детерминации в процессе деформирования. Видно, что в 1 и 3 экспериментах существует момент времени t_c , до которого коэффициент детерминации экспоненциальной функции больше, чем коэффициент детерминации сте-

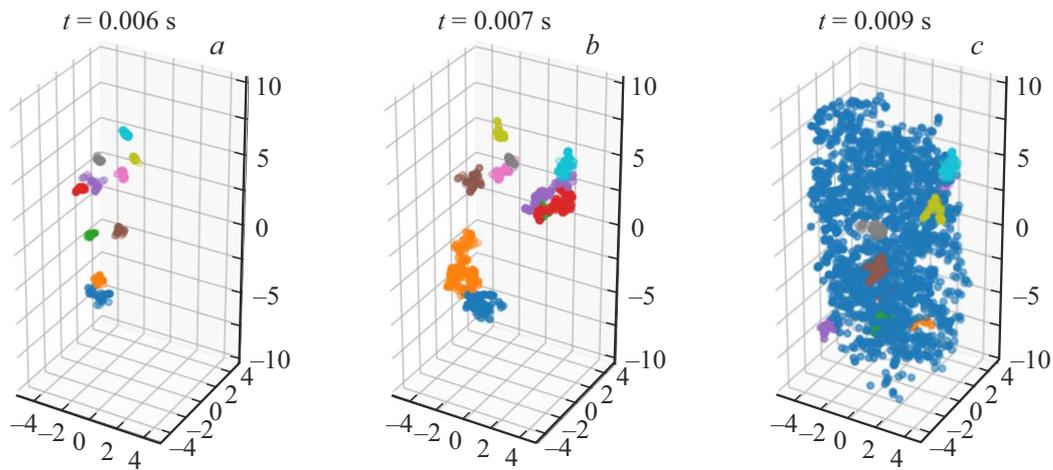


Рис. 4. Эволюция дефектной структуры в образце 1. Разным цветом показаны различные дефекты (кластеры разорванных связей).

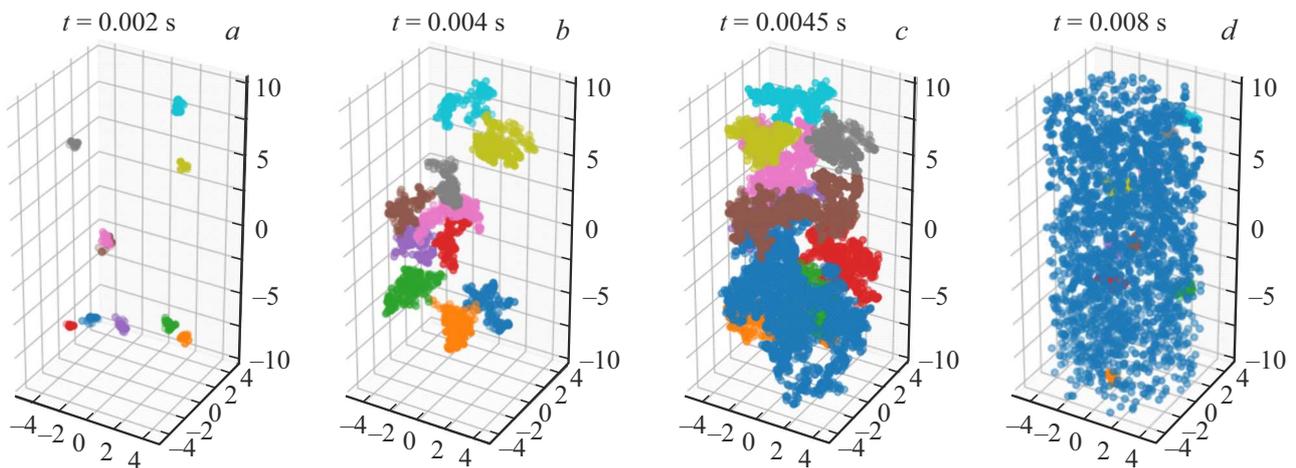


Рис. 5. Эволюция дефектной структуры в образце 2. Разным цветом показаны различные дефекты (кластеры разорванных связей).

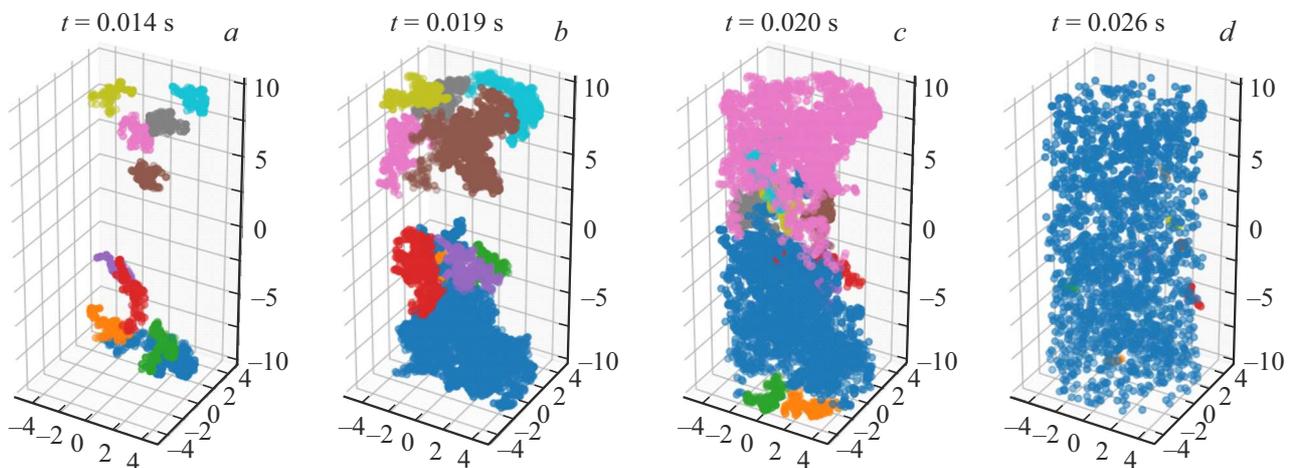


Рис. 6. Эволюция дефектной структуры в образце 3. Разным цветом показаны различные дефекты (кластеры разорванных связей).

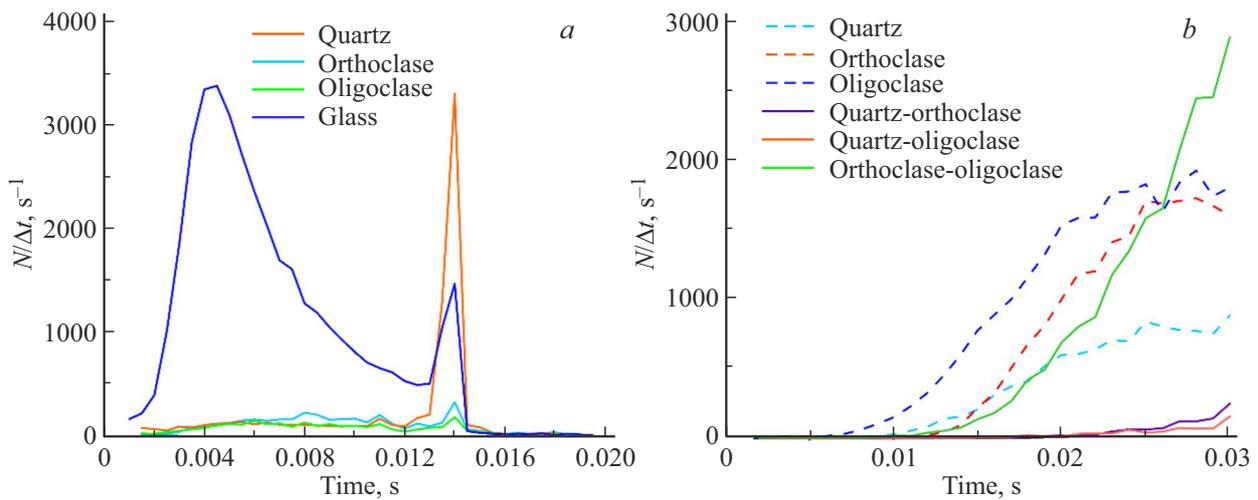


Рис. 7. Кинетика разрыва связей различного типа: *a* — образец со стеклянными связями; *b* — образец с низко модульными связями.

пенной функции. Это означает, что распределения лучше аппроксимируются экспоненциальной функцией. Для образца 1 этот момент 0.009 s, для образца 3 — 0.017 s.

Далее, начиная с момента времени t_c , распределения событий становятся степенными: коэффициент детерминации степенной функции больше, чем коэффициент детерминации экспоненциальной функции.

Несколько иная картина наблюдается при нагружении образца 2. Здесь в начальный момент распределение экспоненциальное (до 0.0021 s). Затем на протяжении практически всего эксперимента распределение амплитуд событий акустической эмиссии сохраняет степенной вид. Лишь в самом конце ($t > 0.18$ s), когда начинается резкое уменьшение напряжения, распределение становится вновь экспоненциальным.

Согласно гипотезе, высказанной нами ранее [14], вид функции распределения событий акустической эмиссии связан с характером накопления дефектов.

На рис. 4, 5 и 6 показаны дефекты, которые образовались в образцах от начала нагружения до определенного момента времени. Приведены картины, характерные для стадий развития процесса.

Образец 1. В начале нагружения появляются дефекты небольших размеров, дисперсно расположенные в объеме образца (рис. 4, *a, b*). Постепенно размер дефектов увеличивается. В течение этого времени распределение амплитуд событий акустической эмиссии имеет экспоненциальный вид. После момента $t_c = 0.009$ s происходит локализация разрушения (рис. 4, *c*) — рост магистральной трещины.

Образец 2. Детальный анализ распределений событий акустической эмиссии показывает, что экспоненциальный вид функции наблюдается до 0.0021 s. В этот период дефекты малых размеров образуются во всем объеме образца (рис. 5, *a*). Далее в диапазоне времени 0.0035–0.006 s продолжается дисперсное образование дефектов, но наблюдается рост их размеров (рис. 5, *b, c*).

В этот период разрываются в основном стеклянные связи низкой прочности (рис. 7, *a*), что приводит к изменению модуля. Восстановление модуля при $t > 0.006$ s объясняется тем, что в это время скорость разрушения стеклянных связей уменьшается, а скорость разрыва других типов связей еще не очень велика (рис. 7, *a*). В $t = 0.008$ s начинается прорастание магистральной трещины (рис. 5, *d*).

Образец 3. До момента времени $t_c = 0.017$ s образуются дефекты сравнительно небольших размеров (порядка 10) во всем объеме образца (рис. 6, *a*). Изменение вида функции распределения амплитуд событий акустической эмиссии в момент $t_c = 0.017$ s связано с выходом диаграммы нагружения на практически линейный участок. Нелинейность диаграммы нагружения в данном случае объясняется тем, что в диапазоне 0.017 – 0.026 s основной вклад в разрушение оказывают высокопрочные связи (1–3 из табл. 1). Менее прочные связи (4–6 из табл. 1) остаются в основном целыми за счет их способности к деформированию из-за их низкого модуля упругости. Кинетику разрыва связей демонстрирует рис. 7, *b*. В этом временном диапазоне наблюдается укрупнение дисперсно распределенных в образце дефектов (рис. 6, *b, c*). Начиная с момента 0.026 s, наблюдается рост магистральной трещины (за счет преимущественного разрушения низко модульных связей).

4. Заключение

Построена компьютерная модель, основанная на методе дискретных элементов, которая позволяет детально исследовать образование и развитие дефектов в процессе нагружения. Показано, что образец, все границы в котором имеют свойства ортоклаза, разрушается хрупко путем образования одной магистральной трещины. В то

время как образцы, в которых присутствуют стеклянные и низко модульные границы, проявляют свойства подобные пластичности. Преимущества модельных экспериментов (по сравнению с натурными) состоит в том, что они позволили сопоставить картину эволюции дефектной структуры и параметров событий акустической эмиссии. Анализ вида функции распределения амплитуд акустических событий позволил выявить моменты времени, после которых изменяется характер разрушения. В однородном образце (все границы — ортоклаз) — это начало локализации дефектов (рост магистральной трещины). В образце 2, демонстрирующим нелинейную диаграмму напряжение-деформация, — момент изменения модуля, связанный с преимущественным разрывом стеклянных связей. В образце 3 — момент времени, когда начинается преимущественное разрушение высокопрочных связей.

Несмотря на различные причины, приводящие к изменению характера дефектообразования, степенной вид распределений амплитуд событий акустической эмиссии, сопровождающей образование и рост дефектов, позволяет говорить о том, что система дефектов переходит в состояние самоорганизованной критичности.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] D.A. Lockner, J.D. Byerlee, V. Kuksenko, A. Ponomarev, A. Sidorin. *Nature* **350**, 39 (1991).
- [2] Л.Р. Ботвина. *Физика Земли* **10**, 5 (2011).
- [3] M. Petružálek, J. Vilhelm, V. Rudajev, T. Lokajíček, T. Svitek. *Int. J. Rock Mech. Mining Sci.* **60**, 208 (2013).
- [4] Y. Hamie, O. Katz, V. Lyakhovsky, Z. Reches, Yu. Fialko. *Geophys. J. Int.* **167**, 1005 (2006).
- [5] V. Kuksenko, N. Tomilin, E. Damaskinskaya, D. Lockner. *Pure Appl. Geophys.* **146**, 2, 253 (1996).
- [6] В.Б. Смирнов, А.В. Пономарев, П. Бернар, А.В. Патонин. *Физика Земли* **2**, 17 (2010).
- [7] Xinglin Lei, Shengli Ma. *Earthq. Sci.* **27**, 6, 627 (2014).
- [8] Y. Tal, T. Goebel, J.P. Avouac. *Earth Planetary Sci. Lett.* **536** (2020).
- [9] A. Carpinteri, A. Chiodoni, A. Manuello, R. Sandrone. *Strain* **47**, 282 (2011).
- [10] A.V. Ponomarev, A.D. Zavyalov, V.B. Smirnov, D.A. Lockner. *Tectonophysics* **277**, 57 (1997).
- [11] O.B. Naimark. *Phys. Mesomech. J.* **4**, 4, 45 (2003).
- [12] И. А. Пантелеев, О. А. Плехов, О. Б. Наймарк. *Физика Земли* **6**, 43 (2012).
- [13] X. Lei. *Appl. Sci.* **9**, 12, 2498 (2019).
- [14] E. Damaskinskaya, D. Frolov, D. Gafurova, D. Korost, I. Panteliev. *Interpretation* **5**, 4, SP1 (2017).
- [15] D. Krajcinovic. *Mech Mater.* **8**, 117 (1998).
- [16] A. Lisjak, G. Grasselli. *J. Rock Mech. Geotech. Eng.* **6**, 301 (2014).
- [17] P.A. Cundall. In: *Proc. of the Symposium of Int.Soc. of Rock Mechanics 1. Nancy, France (1971). Paper No. II.*
- [18] В.Л. Гиляров, Е.Е. Дамаскинская. *ФТТ* **64**, 6, 676 (2022).
- [19] D.O. Potyondy, P.A. Cundall. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* **41**, 1329 (2004).
- [20] M. Dosta, V. Skorych. *Software* **X12**, 100618 (2020).
- [21] M. Ester, H.-P. Kriegel, J. Sander, X. Xu. In: *Proc. of the Second Int. Conf on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD-96) / Evangelos Simoudis, Jiawei Han, Usama M. Fayyad. AAAI Press (1996). P. 226.*

Редактор Т.Н. Василевская