

Компьютерное исследование возбуждения дисперсии скоростей мезочастиц в результате прохождения ударной волны

А. М. Кривцов, Ю. И. Мещеряков

Санкт-Петербургский государственный технический университет
Институт проблем машиноведения РАН

Аннотация

Исследование центрального удара тонкого плоского ударника по плоской мишени из того же материала проводится методом молекулярной динамики. Частицы интерпретируются как элементы мезоскопического масштабного уровня. Исследуется зависимость деформации, скорости и дисперсии внутри материала от продольной координаты z . Показано, что дисперсия скоростей частиц возбуждается фронтом ударной волны и следует за ним с некоторой задержкой. Из экспериментов следует, что не смотря на удвоение массовой скорости на свободной поверхности мишени, возрастания дисперсии на свободной поверхности не происходит. Исследуются кинетические процессы в зоне откольного разрушения.

1 Введение

Макроскопическая прочность материала существенно зависит от кинетики материала на мезоскопическом масштабном уровне (0.1–10 μm) [1, 2]. Функции распределения скоростей мезочастиц и их статистические моменты, такие как средняя скорость, дисперсия скоростей, эксцесс функции распределения могут быть измерены в реальном времени при помощи интерференционных методов в процессе экспериментов по одноосному ударному нагружению [2, 3]. Из экспериментальных данных известно [2, 4], что дисперсия скоростей мезочастиц характеризует интенсивность релаксационных процессов во время прохождения ударной волны, а следовательно, повышает прочность материала. Но из экспериментов удается определить распределение скоростей только на внешних поверхностях образца. Информация о распределении скоростей внутри материала может быть получена только из косвенных источников, таких как металлографический анализ образцов после нагружения.

Сказанное выше послужило причиной постановки и проведения компьютерных экспериментов, которые бы могли помочь понять кинетику материала внутри образца в процессе ударного нагружения. Метод молекулярной динамики [6, 7, 8] позволяет с одинаковой легкостью наблюдать распределение скоростей частиц как на поверхности, так и внутри образца. Если же в областях, где возможно сравнение компьютерного моделирования и эксперимента, результаты оказываются близкими, то компьютерное моделирование может быть использовано для исследования поведения материала в областях, не доступных для натурального эксперимента. Основное отличие рассматриваемого в данной работе метода от классической молекулярной динамики состоит в том, что частицы интерпретируются не как атомы или молекулы, а как элементы мезоскопического масштабного уровня.

2 Методы

Так как цель данной работы состоит в качественном исследовании процессов, возникающих в материале при прохождении ударной волны, то будет использоваться простая молекулярно-динамическая модель, подробно описанная в работе [5]: вещество моделируется одноатомной двумерной кристаллической решеткой с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса. Компьютерная модель эксперимента, насчитывающая 20000 частиц, представлена на Рис. 1. Частицы расположены в плоскости xz , направление z (направление удара) будем называть продольным направлением, направление x будем называть поперечным,

Частицы образуют два прямоугольника, моделирующие собой сечения ударника (черный цвет) и мишени (серый цвет). Изначально частицы упорядочены в треугольную решетку, одинаковую для ударника и мишени.

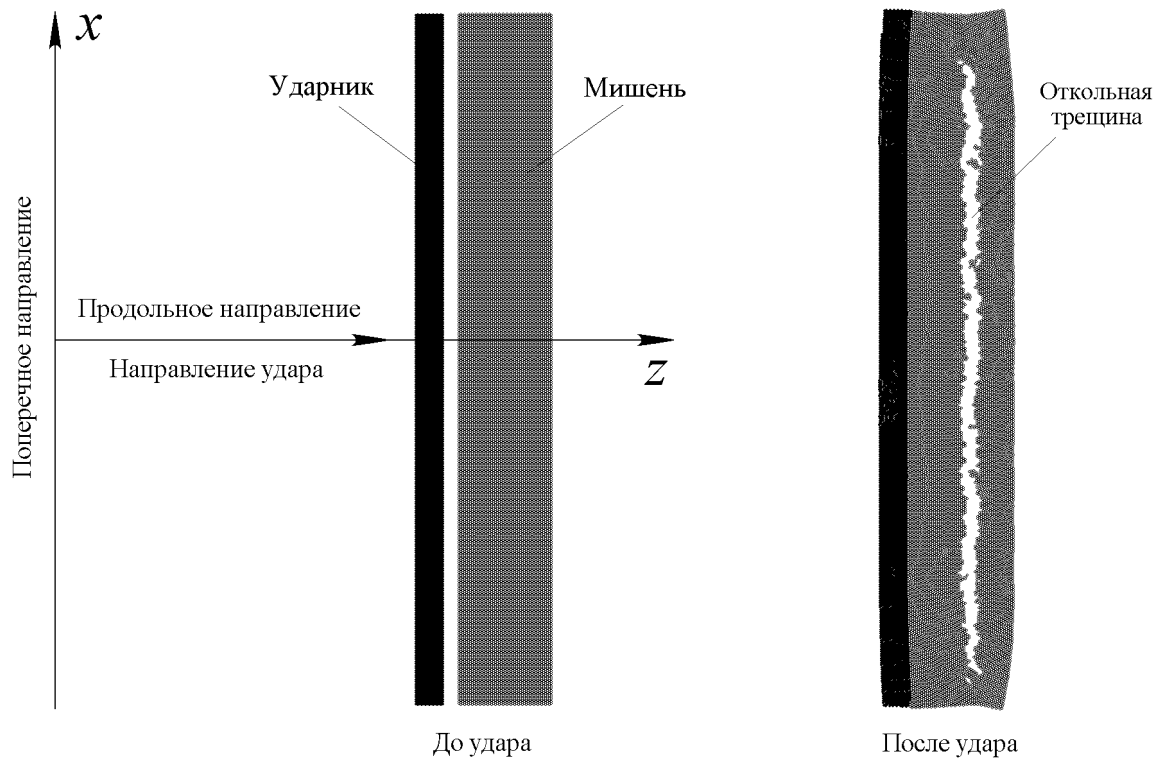


Рис. 1: : Компьютерная модель ударного нагружения.

Решетка ориентирована таким образом, чтобы одна из сторон треугольников была параллельна оси x . Начальное расстояние между ударником и мишенью превосходит максимальное расстояние взаимодействия частиц. На всех внешних границах используются свободные граничные условия.

Изначально мишень имеет нулевую скорость, ударник имеет скорость направленную вдоль оси z в сторону мишени. Кроме того, к начальной скорости каждой частицы добавляется случайная скорость выбранная из двумерного равномерного случайного распределения. Рассмотрим совокупность частиц пронумерованных $k = 1, 2, \dots, n$. Обозначим V_{kz} , V_{kx} — проекции скоростей частиц на направления z и x : продольные и поперечные скорости. Соответствующие средние скорости определяется формулами

$$\bar{V}_z = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n V_{kz}, \quad \bar{V}_x = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n V_{kx}. \quad (1)$$

Дисперсия продольных и поперечных скоростей

$$\sigma_z = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (V_{kz} - \bar{V}_z)^2, \quad \sigma_x = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (V_{kx} - \bar{V}_x)^2. \quad (2)$$

Далее будут использоваться квадратные корни из дисперсий

$$\Delta V_z = \sqrt{\sigma_z}, \quad \Delta V_x = \sqrt{\sigma_x}. \quad (3)$$

Величины ΔV_z , ΔV_x представляют собой среднеквадратические отклонения скоростей от их среднего значения, Далее, для краткости, будем называть эти величины девиациями, соответственно, продольной и поперечной скоростей. В начальный момент времени ударник и мишень имеют некоторое одинаковое значение начальной дисперсии $\sigma_{0x} = \sigma_{0y} = \sigma_0$. Начальная девиация равна $\Delta V_0 = \sqrt{\sigma_0}$.

3 Результаты

Для наглядности, масштабы времени, расстояния и скорости при компьютерном моделировании были приведены в соответствие с соответствующими масштабами в экспериментах с пластичными сталями [2]. Для образцов в компьютерных экспериментах были выбраны следующие размеры: толщина ударника (размер по z) 2 мм, толщина мишени 7 мм, диаметр ударника (размер по x) 52 мм, диаметр мишени совпадает с диаметром ударника. На Рис. 4–6 представлены результаты компьютерных экспериментов. Образец состоит примерно из 20000 частиц. Скорость ударника равна 300 м/с.

Ряды графиков на Рис. 4–5 соответствует последовательным моментам времени после начала эксперимента. Колонки на Рис. 4–5 показывают зависимости от продольной координаты z величин продольной деформации ε_z , продольной скорости V_z , девиации ΔV_z продольной скорости и девиации ΔV_x поперечной скорости. Положительные значения деформации означают сжатие, отрицательные — растяжение. Координата z является координатой частиц ударника и мишени в начальный момент времени $t = 0$. После первого касания (примерно при $t = 0.05 \mu\text{s}$) ударник и мишень соприкасаются вдоль всей x -поверхности. Поэтому первые 2 мм оси z соответствуют ударнику, а остальные 7 мм — мишени. Для каждого значения z деформация и продольная скорость V_z осреднены по одному поперечному ряду частиц (т. е. по цепочке частиц, вытянутой в поперечном направлении). Для устранения краевых эффектов используется только центральная половина этого ряда. Та-же совокупность частиц используется для вычисления девиаций.

Первый ряд ($t = 0.0 \mu\text{s}$) на Рис. 4 соответствует началу эксперимента. Деформация (первый график) равна нулю везде кроме области на границе между ударником и мишенью. Большие отрицательные значения в этой области соответствуют начальному промежутку между ударником и мишенью. График для продольной скорости V_z имеет ступенчатую форму: $V_z = 200 \text{ м/с}$ на первых 2 мм (ударник), и V_z обращается в ноль в остальной области (мишень). Девиации продольной и поперечной скоростей (3-й и 4-й графики) в принятом масштабе неотличимы от нуля.

Второй ряд ($t = 0.1 \mu\text{s}$) на Рис. 4 соответствует началу удара. Ударная волна сжатия хорошо видна на первом графике, она распространяется от границы между ударником и мишенью симметрично в двух направлениях: вперед (внутри мишени) и назад (внутри ударника). Второй график показывает хорошо известный теоретический результат, что массовая скорость в материале в два раза меньше, чем скорость ударника. На этом графике могут быть выделены три области с различными постоянными значениями скорости: первая область с $V_z = 300 \text{ м/с}$ соответствует той части ударника, в которую еще не проникла ударная волна; вторая область с $V_z = 150 \text{ м/с}$ соответствует части ударника и мишени, возмущенной ударной волной; третья область с нулевой скоростью соответствует части мишени, в которую еще не проникла ударная волна. Девиации (3-й и 4-й графики) по-прежнему пренебрежимо малы.

Четвертый ряд ($t = 0.3 \mu\text{s}$) на Рис. 4 соответствует моменту времени вскоре после того, как ударная волна достигла свободной поверхности ударника. На первом графике видна волна растяжения, образовавшаяся в результате отражения ударной волны от свободной поверхности ударника. Из второго графика видно, что массовые скорости в зоне растяжения отрицательны. 3-й и 4-й графики на Рис. 4 обнаруживают появление дисперсии.

Следующие два ряда ($t = 0.4 \mu\text{s}$, $t = 0.5 \mu\text{s}$) демонстрируют распространение ударной волны внутри мишени. Рассмотрим 3-й график в этих рядах: зависимость девиации продольных скоростей ΔV_z от координаты z . Из графиков видно, что девиация возникает сразу за волновым фронтом, возрастает до максимального значения, который следует за волновым фронтом с некоторой отставанием (около 1.5 мм). После своего максимального значения дисперсия медленно убывает до равновесного состояния. Таким образом, из графиков следует, что дисперсия генерируется фронтом ударной волны. 4-й график показывает, что значения дисперсии поперечных скоростей ΔV_x близки к значениям дисперсии продольных скоростей ΔV_z , но отставание от волнового фронта больше, а максимальное значение ΔV_x меньше, чем у ΔV_z .

Следующий ряд ($t = 0.7 \mu\text{s}$) соответствует моменту времени вскоре после того, как ударная волна достигла свободную поверхность мишени. На первом графике видна волна растяжения, образовавшаяся в результате

отражения ударной волны от свободной поверхности мишени. Второй график показывает хорошо известный теоретический факт удвоения скорости на свободной поверхности: когда ударная волна достигает свободную поверхность, массовая скорость возрастает в 2 раза и, следовательно, скорость свободной поверхности мишени становится равной скорости ударника. Но неожиданный результат обнаруживается на 3-м и 4-м графиках: девиация скоростей не возрастает на свободной поверхности. Таким образом поведение дисперсии сильно отличается от поведения скорости.

На первом графике при $t = 0.8 \mu\text{s}$ (Рис. 5) можно увидеть две волны разгрузки движущиеся навстречу друг другу. Когда они встречаются (ряд $t = 1.0 \mu\text{s}$) они образуют область очень сильного растяжения, в которой несколько позже начинается откольное разрушение — узкая область с большими отрицательными значениями на первом графике в рядах $1.2 \mu\text{s} \leq t \leq 1.5 \mu\text{s}$. Волна растяжения, сопровождаемая некоторым увеличением ΔV_z , движется в отрицательном направлении к свободной поверхности ударника ($t = 1.5 \mu\text{s}$). Рассмотрим теперь 3-ю колонку — девиация продольных скоростей ΔV_z . Хорошо видно, что в откольной зоне девиация имеет острый максимум. Аналогичный эффект заметен и для девиации поперечных скоростей ΔV_x , однако максимальное значения ΔV_x значительно меньше (4-ая колонка).

В первой колонке при $1.2 \mu\text{s} \leq t \leq 1.5 \mu\text{s}$ хорошо заметны колебания в откольной тарелке (область справа от зоны разрушения). Эти колебания делают дисперсию в откольной тарелке больше, чем дисперсия в остальной части образца (3-ая и 4-ая колонки).

Образование откольной трещины в образце показано на Рис. 6. Как это было на Рис. 5–6, первая колонка показывает продольную деформацию. Вторая колонка показывает девиацию продольных скоростей. Последняя колонка демонстрирует состояние образца в различные моменты времени (образец развернут на 90°). При $t = 0.9 \mu\text{s}$ разрушение еще не наблюдается. При $t = 1.0 \mu\text{s}$ появляется множество крошечных трещин, которые увеличиваются к $t = 1.1 \mu\text{s}$, а к $t = 1.2 \mu\text{s}$ они объединяются в большие трещины, вытянутые в поперечном направлении. При $1.3 \mu\text{s} \leq t \leq 1.5 \mu\text{s}$ все трещины объединяются в одну магистральную трещину, и к $t = 1.6 \mu\text{s}$ откольная трещина в центральной части образца оказывается полностью сформированной. Отметим, что толщина откольной тарелки оказывается близкой к толщине ударника, как и следует из теории. Из Рис. 6 следует, что самое высокое значение дисперсии отвечает моменту времени $t = 1.3 \mu\text{s}$, соответствующему началу формирования откольной трещины.

4 Обсуждение

Для величин, которые могут быть получены на базе механики сплошной среды (таких как продольная деформация и массовая скорость), предлагаемые компьютерные эксперименты показывают очень хорошее согласие с теорией: распространение ударной волны, отражение ударной волны от свободных поверхностей, соотношение между скоростями на поверхности и внутри образца, образование откола в зоне встречи двух волн разгрузки и т. д. [9]. С другой стороны, в величинах (таких как скорость свободной поверхности и дисперсия скоростей мезочастиц на свободной поверхности), которые могут быть измерены как в компьютерных, так и в реальных экспериментах, рассмотренная модель дает хорошее согласие с известными результатами — см. [2, 5, 10]. Это дает уверенность в том, что для величин, которые не могут быть измерены в реальности (таких, как дисперсия скоростей внутри материала) информация может быть получена из подобных компьютерных экспериментов. Наиболее неожиданный результат компьютерных экспериментов состоит в том, что девиация скоростей не возрастает на свободной поверхности, не смотря на то, что скорости возрастают в 2 раза.

Разумеется, рассмотренная модель слишком груба, чтобы строго описывать динамическую прочность реальных материалов, но, тем не менее, она позволяет описать общие тенденции, которые могут быть использованы при исследовании этих материалов. Отметим, что если рассматривать частицы как элементы микроскопического масштабного уровня, то проведенные компьютерные эксперименты могут интерпретироваться как исследование изменения абсолютной температуры монокристалла в результате прохождения ударной волны.

5 Выводы

- Дисперсия продольных скоростей мезочастиц ($\sigma_z = \Delta V_z^2$) возбуждается фронтом ударной волны и следует за ним с некоторой задержкой (см. Рис. 2).
- Дисперсия поперечных скоростей мезочастиц ($\sigma_x = \Delta V_x^2$) близка к σ_z но отставание от волнового фронта для σ_x больше (см. Рис. 2).
- В зоне откольного разрушения дисперсия имеет локализованный максимум (в этой зоне ΔV_z более чем в 2 раза превосходит значения ΔV_z в окружающих областях) (Рис. 3).
- Самое высокое значение дисперсии соответствует моменту времени, когда начинается формирование откольной трещины.
- Средняя дисперсия в откольной тарелке больше, чем дисперсия в остальной части образца (Рис. 3).
- Не смотря на удвоение скорости на свободной поверхности, дисперсия скоростей на свободной поверхности не возрастает,

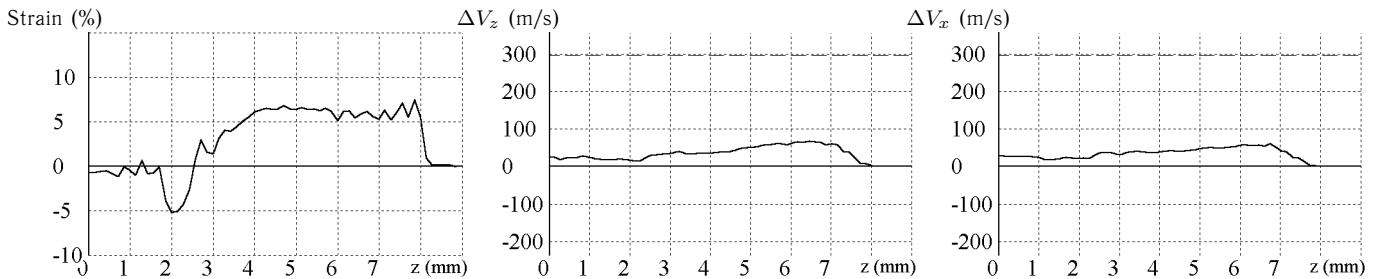


Рис. 2: : Дисперсия возбуждается волновым фронтом ($t = 0.5 \mu\text{s}$).

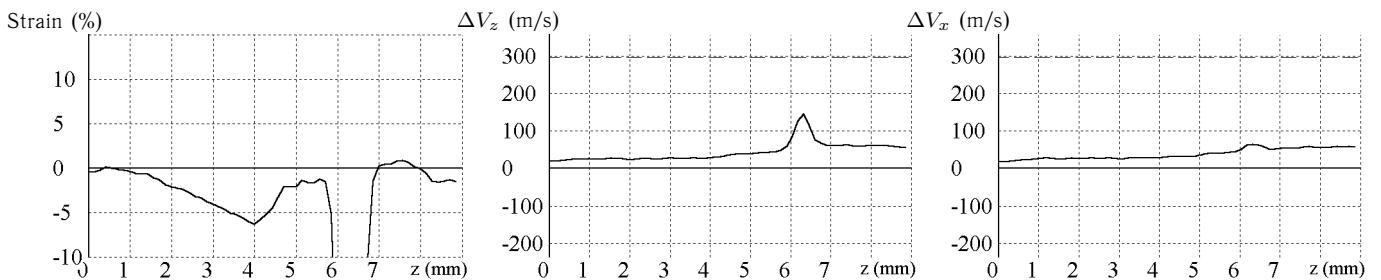


Рис. 3: : Локализованный максимум дисперсии в откольной зоне ($t = 1.3 \mu\text{s}$).

Список литературы

- [1] *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов*. Ред. Панин, В. Е. Новосибирск: Наука, 1995.
- [2] Mescheryakov, Y. I. and Divakov, A. K., Multiscale kinetics of microstructure and strain-rate dependence of materials. *ДУМАТ J.*, 1994, **4**, 271–287.

- [3] Asay, J. R. and Barker, L. M., Interatomic measurement of shock-induced internal particle velocity and spatial variation of particle velocity. *J. Appl. Phys.*, 1974, **45**, 2545–2550.
- [4] Mescheryakov, Y. I., Mahutov, N. A., and Atroshenko, S. A, Micromechanisms of dynamic fracture of ductile high-strength steels, *J. Mech. Phys. Sol*, 1994, **42**, 1435–1457.
- [5] Кривцов, А. М., Компьютерное исследование взаимосвязи между откольной прочностью и дисперсией скоростей мезочастиц. *Настоящий сборник*.
- [6] Allen, M. P. and Tildesley, A. K., *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [7] Экштайн, В., *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*. М.: Мир, 1995.
- [8] Krivtsov, A. M., Zhilin, P. A., Particle Simulation of Large Inelastic Deformations. *Transactions of the 14th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor technology (SMiRT 14)*, 1997, Lyon, France, 121–128.
- [9] Curran, D. R. and Seaman, L., Dynamic failure of solids. *Phys. Reports*, 1987, **147**, 253–388.
- [10] Yano, K., Horie, Y., Numerical Computation of Non-equilibrium Particle Velocities within Shock Structure in Condensed Mixtures. *1997 Topical Conference on Shock Compression of Condensed Matter*, 1997, Amherst, MA, USA.

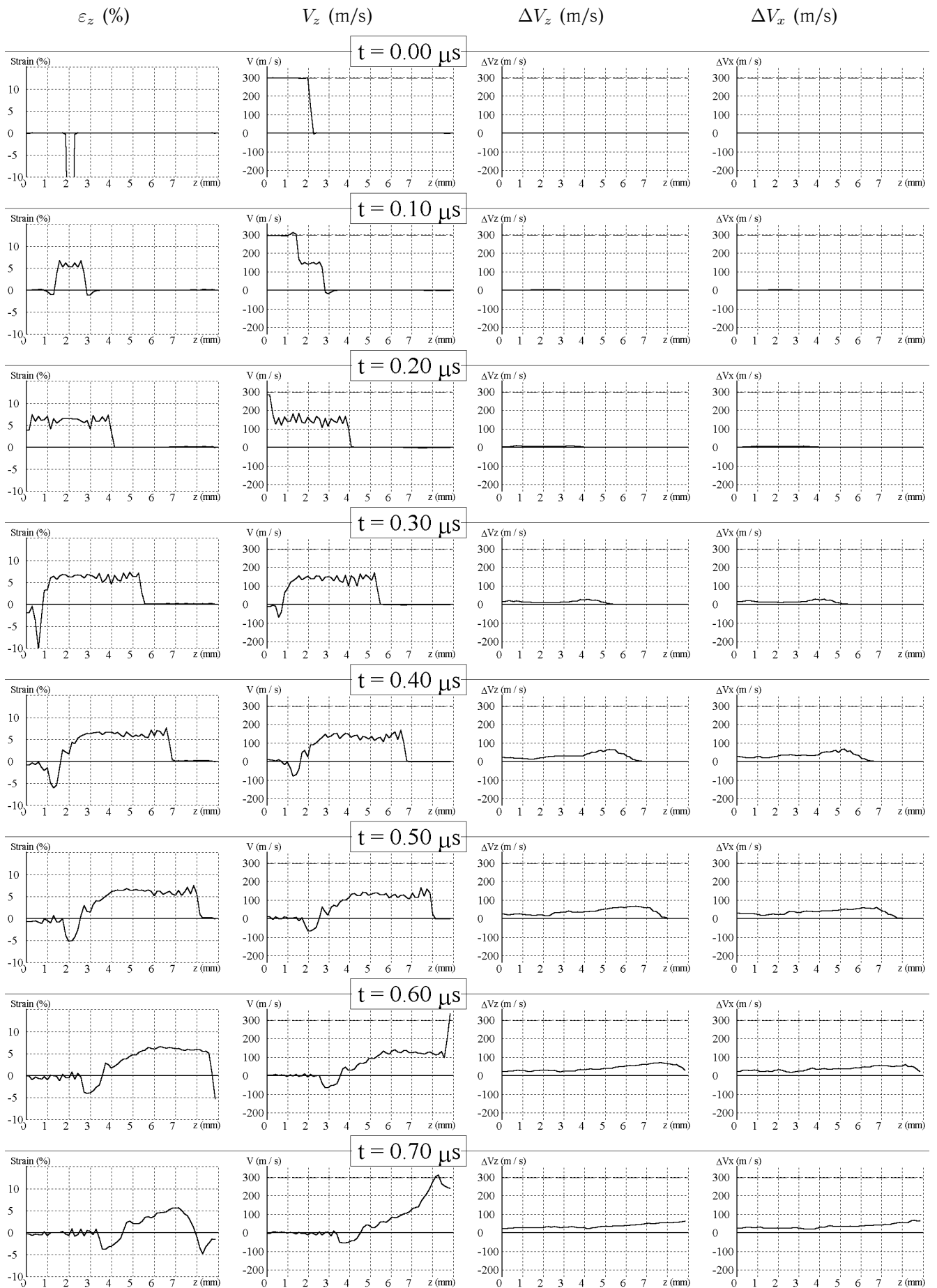


Рис. 4: : Распределение деформации, скорости и дисперсии внутри образца вдоль направления удара ($0 < t < 0.7 \mu\text{s}$).

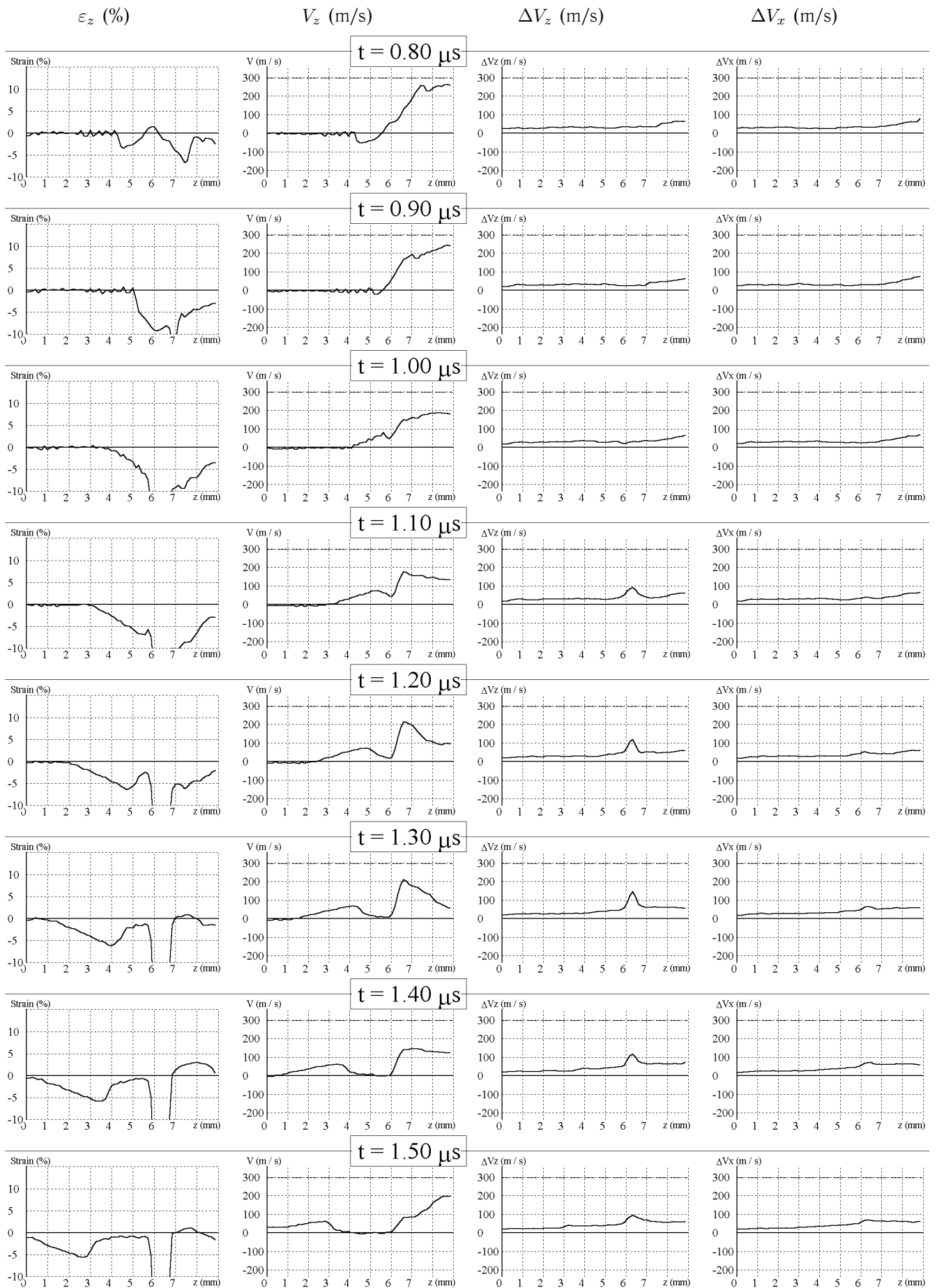


Рис. 5: : Распределение деформации, скорости и дисперсии внутри образца вдоль направления удара; $0.7 \mu\text{s} < t < 1.5 \mu\text{s}$.

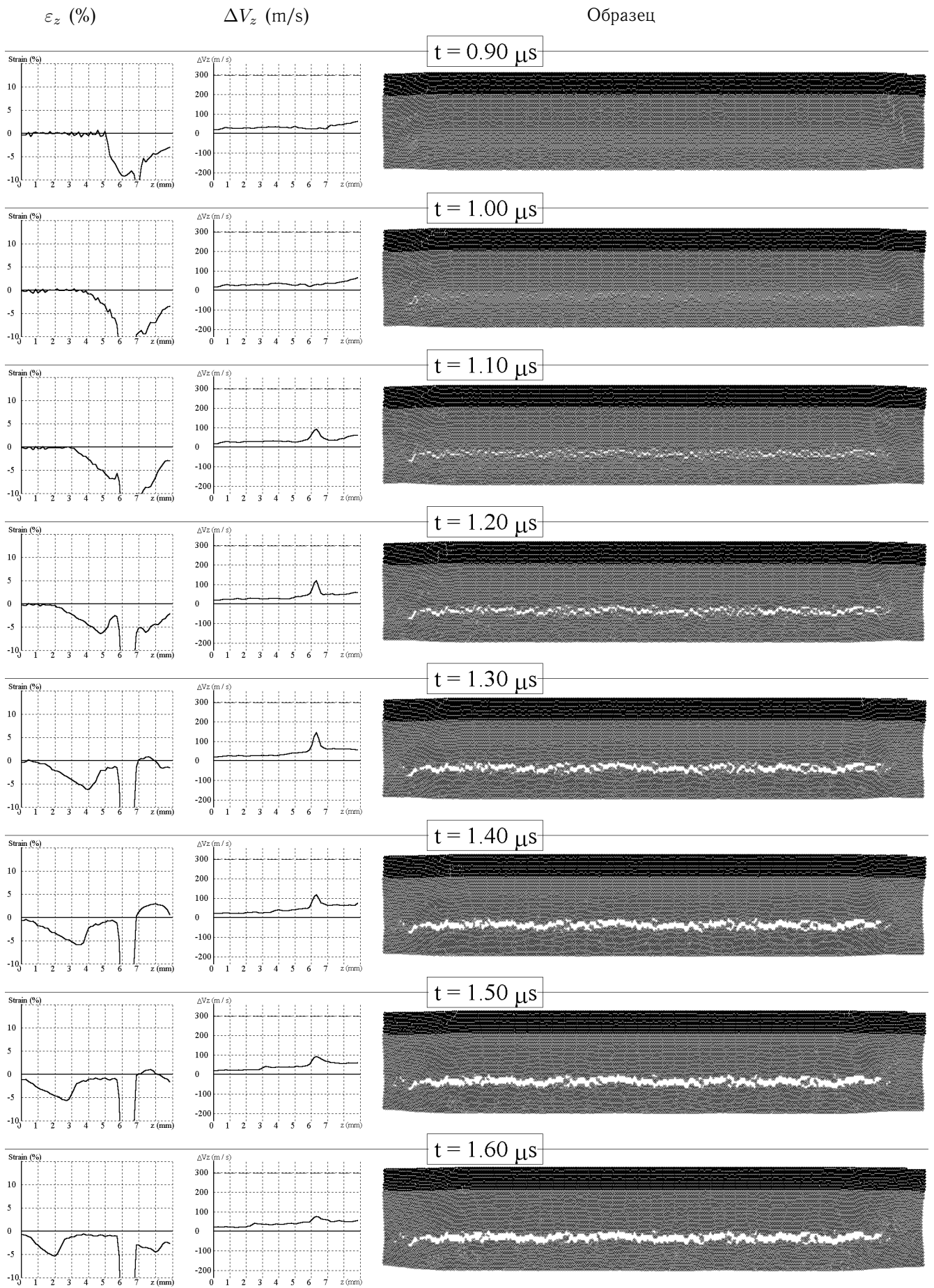


Рис. 6: : Образование откольной трещины в образце ($0.9 \mu s < t < 1.6 \mu s$).