

# Компьютерное исследование взаимосвязи между откольной прочностью и дисперсией скоростей мезочастиц

А. М. Кривцов

Санкт-Петербургский государственный технический университет  
Институт проблем машиноведения РАН  
E-Mail: krivtsov@AK5744.spb.edu

## Аннотация

Из экспериментов по ударному нагружению плоских образцов было получено, что максимальная откольная прочность соответствует тестам, в которых наблюдается максимальное значение дисперсии скоростей мезочастиц. Работа посвящена компьютерному исследованию этого явления. Используется метод молекулярной динамики. Показано, что увеличение начальной дисперсии от нуля до величины, соответствующей скоростям частиц 15–25 м/с, приводит к существенному увеличению прочности материала. Дальнейшее увеличение начальной дисперсии приводит к медленному уменьшению прочности материала. Таким образом существует оптимальное значение начальной дисперсии скоростей мезочастиц, соответствующее максимальной прочности материала.

## 1 Введение

Основными характеристиками, которые могут быть измерены в реальном времени в экспериментах по откольному разрушению, являются средняя скорость и дисперсия скоростей мезочастиц на свободной поверхности мишени [1, 2, 3]. Из экспериментов известно [2], что дисперсия скоростей мезочастиц характеризует способность материала релаксировать микронапряжения во время прохождения ударной волны, а следовательно она определяет макроскопическую динамическую прочность материала: чем больше дисперсия скоростей мезочастиц — тем больше откольная прочность материала. В настоящей работе проводится компьютерное исследование этого явления. Используется метод молекулярной динамики [4, 5, 6]. Основное отличие используемого метода от классической молекулярной динамики состоит в том, что частицы интерпретируются не как атомы или молекулы, а как элементы мезоскопического масштабного уровня. Подобный подход позволяет обнаружить существенную зависимость прочности материала от дисперсии скоростей мезочастиц даже при использовании простейшей вычислительной схемы.

## 2 Методы

Так как цель данного исследования состоит в определении качественной взаимосвязи между прочностью и дисперсией, то для молекулярно-динамического моделирования была выбрана модель одноатомной двумерной кристаллической решетки со стандартным потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса [5]

$$U(r_{ij}) = \epsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где  $U(r_{ij})$  — энергия взаимодействия между частицами  $i$  и  $j$ , разделенными расстоянием  $r_{ij}$ , коэффициент  $\epsilon$  определяет интенсивность взаимодействия,  $r_0$  — характерная единица длины. Для того, чтобы уменьшить время расчета, потенциал обычно обрезается на некотором конечном расстоянии. В предлагаемых компьютерных экспериментах в качестве такого расстояния выбрана величина  $2.1 r_0$ . В этом случае потенциал взаимодействия имеет вклады от первых, вторых и третьих ближайших соседей в идеальном кристалле. Однако, вклад от соседей второго и третьего уровня в общую энергию минимален и, таким образом, расстояние  $r_0$  приближенно

равно минимальному расстоянию между частицами в равновесном положении кристаллической решетки. Для того, чтобы описать неупругие потери энергии, в модель были добавлены малые диссипативные силы, пропорциональные скоростям частиц [7]. Техника моделирования, предлагаемая в данной работе, представляет собой стандартный метод молекулярной динамики [4, 5, 8]: траектории каждой частицы определяются путем интегрирования классических Ньютоновских уравнений движения. При интегрировании используется метод центральных разностей [5].

Расчетная модель представлена на Рис. 1. Частицы образуют два прямоугольника, лежащих в плоскости  $xz$ . Прямоугольники моделируют собой сечения ударника (черный цвет) и мишени (серый цвет). Ударник и ми-

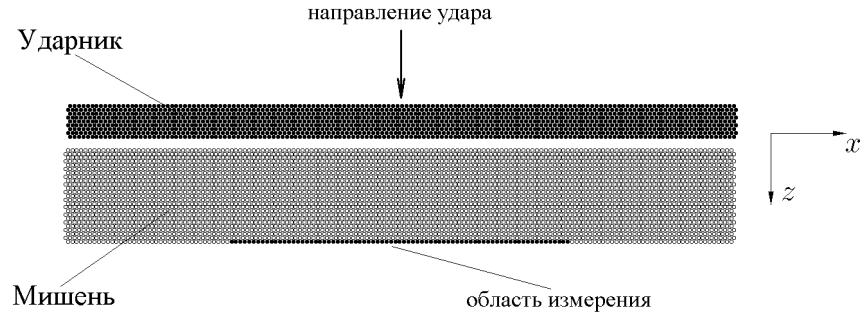


Рис. 1: : Исходное состояние образца.

шень состоят из одинаковых частиц. Изначально частицы упорядочены в треугольную решетку, одинаковую для ударника и мишени. Решетка ориентирована таким образом, чтобы одна из сторон треугольников была параллельна оси  $x$ . Начальное расстояние между ударником и мишенью превосходит максимальное расстояние взаимодействия частиц. Общее число частиц на Рис. 1 около 5000. На всех внешних границах используются свободные граничные условия.

Изначально мишень имеет нулевую скорость, ударник имеет скорость, направленную вдоль оси  $z$  в направлении мишени (см. “направление удара” на Рис. 1). В дополнение к начальной скорости каждой частицы добавляется случайная скорость, выбранная из двумерного равномерного случайного распределения. Рассмотрим совокупность частиц, пронумерованных  $k = 1, 2, \dots, n$ . Обозначим  $V_k$  — проекция скоростей частиц на направление удара. Тогда средняя скорость совокупности частиц определяется формулой

$$\bar{V} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n V_k. \quad (2)$$

Дисперсия скоростей

$$\sigma = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (V_k - \bar{V})^2. \quad (3)$$

Далее будет использоваться квадратный корень из дисперсии

$$\Delta V = \sqrt{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (V_k - \bar{V})^2}. \quad (4)$$

Величина  $\Delta V$  имеет размерность скорости и представляет собой среднеквадратическое отклонение скоростей от их среднего значения. Далее, для краткости, будем называть эту величину девиацией скоростей или просто девиацией. В начальный момент времени ударник и мишень имеют некоторое одинаковое значение начальной дисперсии  $\sigma_0$ , соответствующее начальному распределению скоростей. Начальная девиация равна  $\Delta V_0 = \sqrt{\sigma_0}$ . Целью предлагаемых компьютерных экспериментов является определение зависимости между начальной девиацией и прочностными характеристиками материала.

Отметим, что если рассматривать частицы как элементы микроскопического масштабного уровня (атомы и молекулы), тогда дисперсия  $\sigma$  может быть интерпретирована как абсолютная температура материала. Мы же будем рассматривать частицы как элементы мезоскопического масштабного уровня (0.1–10  $\mu\text{m}$ ). В таком случае

дисперсия  $\sigma$  соответствует дисперсии, которая измеряется в экспериментах [2] и отличается от классической температуры.

Одной из важнейших прочностных характеристик материала является откольная прочность [9], которая пропорциональна откольной (pull-back) скорости  $W$ . Откольная скорость может быть определена из временной зависимости средней скорости на свободной поверхности мишени [2, 9]. Для того, чтобы найти среднюю скорость и другие характеристики на свободной поверхности, будет использоваться центральная часть последнего ряда частиц мишени (см. Рис. 1, “область измерения”). Длина этой области составляет половину от полной длины ряда частиц, что позволяет устранить краевые эффекты.

Другая характеристика, которая будет использоваться для описания прочности материала, представляет собой ширину откольной трещины  $h$  в направлении удара — см. Рис. 2. Используется следующая техника

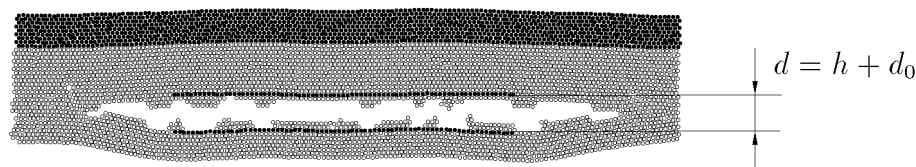


Рис. 2: : Измерение ширины откольной трещины.

измерения ширины откольной трещины. В исходном состоянии образца выбираются два ряда частиц — выше и ниже области, где должна появиться откольная трещина. Измеряется среднее расстояние между рядами при  $t = 0$ . Затем, в процессе эксперимента ( $t > 0$ ) измеряется временная зависимость среднего расстояния  $d(t)$  — Рис. 2. Тогда зависимость ширины трещины от времени может быть получена как

$$h(t) = d(t) - d_0.$$

Для устранения краевых эффектов только центральная часть рядов (половина полной длины) используется для измерений. На Рис. 2 показан образец с трещиной. Ряды, используемые для измерения, выделены черным цветом. Важно, что подобный метод может быть использован в случае, когда имеется множество микротрещин — в этом случае метод дает интегральную ширину микротрещин.

### 3 Результаты

Для того, чтобы сделать результаты более наглядными 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. 4–5 представлены результаты компьютерных экспериментов. Образец состоит примерно из 5000 частиц. Все компьютерные эксперименты проводились с одинаковой скоростью ударника — 260 м/с. Начальная девиация скоростей частиц изменяется от 0, 1, 2 до 100 м/с. Ряды графиков на Рис. 4–5 соответствуют последовательно увеличивающимся значениям девиации. Первая колонка графиков показывает состояние образца при  $t = 4.1 \mu\text{s}$  ( $t = 0$  соответствует мгновению первого контакта ударника с мишенью). Из Рис. 4 хорошо видно, что наибольший размер трещины реализуется при  $\Delta V_0 = 0$ . По мере того, как девиация увеличивается, ширина трещины становится меньше и при  $\Delta V_0 = 25$  м/с трещина полностью исчезает (Рис. 5). Таким образом увеличение дисперсии полностью подавило откольное разрушение! Когда девиация находится в пределах 25 – 40 м/с, откольное разрушение отсутствует. Для  $\Delta V_0 > 40$  м/с трещина появляется снова и увеличивается по мере роста девиации. При значении девиации в 100 м/с наблюдается разрушение образца, вызванное высоким уровнем дисперсии (этот эффект аналогичен температурному разрушению).

Вторая колонка на Рис. 4–5 показывает временную зависимость скорости на свободной поверхности. Вид кривых находится в хорошем соответствии с результатами экспериментов и теоретическими расчетами [2, 10, 11]. Третья колонка на Рис. 4–5 показывает временную зависимость ширины трещины  $h$ . Хорошо видно, что

увеличение девиации приводит к уменьшению ширины трещины, особенно при  $t > 3 \mu\text{с}$ . Для малых девиаций 0–2 м/с зависимость  $h(t)$  является монотонной. Это означает, что ширина трещины растет на протяжении всего эксперимента. Для бóльших значений девиации зависимость  $h(t)$  имеет один или два максимума, после которых ширина трещины начинает уменьшаться. Здесь мы наблюдаем эффект восстановления материала — высокий уровень дисперсии стимулирует релаксационные процессы.

Таким образом, из компьютерных экспериментов следует, что материал с большей дисперсией оказывается более прочным. С чем это связано? Для того, чтобы прояснить ситуацию, рассмотрим Рис. 6, на котором образец показан в два различных момента времени. Левая колонка соответствует  $t = 1.4 \mu\text{с}$ , моменту вскоре после начала откольного разрушения. Правая колонка соответствует состоянию образца после формирования откольной трещины ( $t = 4.1 \mu\text{с}$ ). Ряды графиков, как это было ранее, соответствуют различным значениям начальной девиации  $\Delta V_0$ .

Из первого ряда на Рис. 6 хорошо видно, что когда девиация отсутствует ( $\Delta V_0 = 0$ ), края трещины оказываются абсолютно прямыми. По мере роста девиации края трещины становятся все более и более неровными (правая колонка на Рис. 6). Теперь обратимся к левой колонке, чтобы увидеть как начинается разрушение. При  $\Delta V_0 = 0$  имеется только одна длинная трещина, но при  $\Delta V_0 = 4 \text{ м/с}$  вместо нее наблюдается множество коротких микротрещин. Таким образом, дисперсия приводит к размыванию фронта ударной волны, что в свою очередь приводит к повышению прочности. Отметим, что при  $\Delta V_0 = 20\text{--}25 \text{ м/с}$  микротрещины, имеющиеся в момент времени  $t = 1.4 \mu\text{с}$ , исчезают к моменту  $t = 4.1 \mu\text{с}$ . Мелкие трещины могут исчезать самопроизвольно — это еще одна причина, приводящая к увеличению прочности.

Аналогичные эксперименты на более сложной системе насчитывающей около 20000 частиц показаны на Рис. 7. Скорость ударника 297 м/с. Результаты близки к рассмотренным выше, но эффект увеличения прочности оказывается более резким: уже при  $\Delta V_0 = 9 \text{ м/с}$  откольная трещина не появляется. Высокие значения дисперсии, как это было для 5000 частиц, уменьшают прочность материала — откольная трещина появляется при  $\Delta V_0 = 30 \text{ м/с}$  и увеличивается по мере возрастания дисперсии.

Эксперименты с 20000 частиц дают более качественные графики временных зависимостей для скорости на свободной поверхности — см. вторую колонку на Рис. 7. На первых четырех графиках ( $0 \leq \Delta V_0 \leq 4 \text{ м/с}$ ) временной зависимости скорости, после первого максимума, хорошо видны колебания в откольной тарелке. Отметим, что увеличение дисперсии приводит к уменьшению амплитуды этих колебаний. Для девиаций выше  $\Delta V_0 = 9 \text{ м/с}$  откола не происходит, отсутствуют и колебания в откольной тарелке. При этих значениях девиации появляется новый максимум на временной зависимости скорости — это волна сжатия, отразившаяся от свободной поверхности ударника, прошла сквозь весь образец и достигла свободной поверхности мишени. Для высоких значений дисперсии ( $\Delta V_0 \geq 40 \text{ м/с}$ ) откол снова наблюдается, снова появляются колебания в откольной тарелке, но со значительно более низкими амплитудами. При  $\Delta V_0 > 60 \text{ м/с}$  дисперсия полностью подавляет эти колебания.

## 4 Зависимость прочности от начальной девиации скоростей частиц

Результаты всех экспериментов представлены на Рис. 3, где показаны зависимости ширины трещины  $h$  и откольной скорости  $W$  от начальной девиации. Рис. 3а соответствует экспериментам с 5000 частиц; Рис. 3б соответствует экспериментам с 20000 частиц. Кривая помеченная  $h(4.1 \mu\text{с})$  показывает ширину откольной трещины при  $4.1 \mu\text{с}$  после первого контакта ударника и мишени. Точки на кривой соответствуют результатам, полученным из компьютерных экспериментов. Из Рис. 3а хорошо видно, что ширина откольной трещины резко уменьшается от 2.6 мм (начальная девиация отсутствует) до нуля при  $\Delta V_0 = 20 \text{ м/с}$ . При значениях девиации от  $\Delta V_0 = 20 \text{ м/с}$  до  $\Delta V_0 = 40 \text{ м/с}$  откол отсутствует. После  $\Delta V_0 = 40 \text{ м/с}$  ширина трещины возрастает вплоть до 0.8 мм. Для бóльшей системы результаты аналогичны, но уменьшение ширины откольной трещины происходит еще быстрее, а область значений девиации, при которых отсутствует откол, сдвинута влево.

Кривая помеченная  $h(1.4 \mu\text{с})$  (белые точки) соответствует времени образования микротрещин (начало разрушения). Эта кривая показывает суммарную ширину микротрещин. Она имеет вид, аналогичный кривой для  $h(4.1 \mu\text{с})$ , однако со значительно меньшим изменением значений: ширина трещины меняется от максимального значения 0.5 мм, при отсутствии начальной дисперсии, до наименьшего значения 0.2 мм. Следовательно

суммарная ширина микротрещин больше нуля для всех значений дисперсии, но при высокой дисперсии микротрещины самопроизвольно исчезают по прошествии нескольких микросекунд: для девиации от 12 м/с до 54 м/с белая кривая лежит выше черной.

Кривая помеченная  $W$  на Рис. 3 показывает зависимость откольной скорости от начальной девиации. Напомним, что откольная скорость  $W$  вычисляется как разность между первым максимумом и первым минимумом на временной зависимости скорости на свободной поверхности [9]. Откольная скорость пропорциональна откольной прочности материала: это одна из основных прочностных характеристик, которые могут быть получены из экспериментов по откольному разрушению. Из Рис. 3 следует, что  $W$  имеет максимум в том же месте, где ширина откольной трещины имеет минимум. Таким образом оба критерия: откольная прочность и ширина откольной трещины дают одинаковый результат. Однако, очевидно, чувствительность второго критерия значительно выше. Отметим, что для того чтобы определить значение  $W$ , временная зависимость скорости на свободной поверхности была подвергнута фильтрации, позволившей удалить высокочастотные колебания.

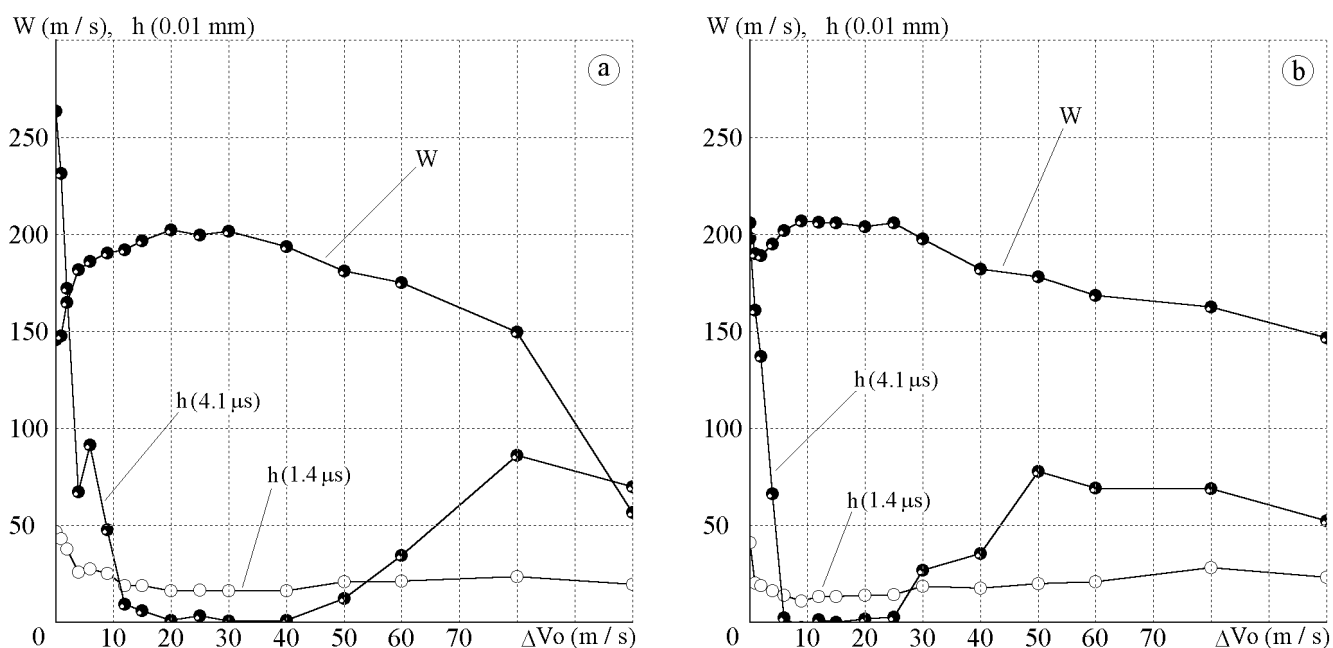


Рис. 3: : Зависимость откольной скорости  $W$  и толщины откольной трещины  $h$  от начальной девиации: результаты экспериментов с а) 5000 частиц, б) 20000 частиц.

## 5 Обсуждение

Рассмотренные компьютерные эксперименты показали, что значение начальной дисперсии скоростей оказывает сильное влияние на откольную прочность материала. Из анализа изменения во времени формы откольной трещины в процессе ударного нагружения следует, что можно выделить две основные причины, благодаря которым дисперсия увеличивает прочность материала. Первая причина состоит в том, что дисперсия ослабляет локализацию ударного разрушения — толщина области разрушения значительно меньше при высокой дисперсии. Но так как энергия ударной волны одинакова, напряжения в зоне разрушения значительно уменьшаются. Вторая причина состоит в том, что дисперсия стимулирует релаксационные процессы в материале — микротрещины, которые появляются на начальной стадии разрушения, могут спонтанно исчезнуть, если дисперсия достаточно высока. Эти результаты компьютерных экспериментов согласуются с результатами натуральных экспериментов, проведенных со стальными и алюминиевыми образцами [2, 12]. В частности, в работе [2] показано, что дисперсия скоростей мезочастиц характеризует интенсивность релаксационных процессов на мезоуровне, а следовательно повышает прочность материала. Из рассмотренных компьютерных экспериментов следует, что если начальная дисперсия очень высока, то она приводит к обратному результату — прочность материала

уменьшается. В этом случае мы получаем ситуацию аналогичную уменьшению прочности материала при высоких температурах. К примеру, недавно проведенные эксперименты с алюминием и магнием показали резкое уменьшение прочности, когда температура образцов приближалась к точке плавления [13]. С точки зрения процессов на мезоуровне, высокая дисперсия уменьшает плотность материала, делает его более рыхлым, а следовательно, менее прочным.

Компьютерная модель, которая использовалась в данной работе, достаточно примитивна: идеальная одноатомная решетка с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса. Если рассматривать частицы как элементы микроскопического масштабного уровня (например, атомы), то результаты могут интерпретироваться иначе: в компьютерных экспериментах была получена зависимость динамической прочности монокристалла от абсолютной температуры. Если мы рассматриваем частицы как элементы мезоскопического масштабного уровня, тогда вместо температуры мы должны использовать термин “дисперсия мезочастиц”. Разумеется, рассмотренная модель слишком груба, чтобы описывать динамическую прочность реальных материалов, но тем не менее полученные результаты находятся в хорошем соответствии с результатами реальных экспериментов. Таким образом, предлагаемая модель позволяет описать общие тенденции взаимосвязи прочности и дисперсии в реальных материалах. Для точных же расчетов желательно использование более сложных моделей.

## 6 Выводы

1. Компьютерные эксперименты показали, что увеличение начальной дисперсии от нуля до 15–25 м/с приводит к существенному увеличению прочности материала. Дальнейшее увеличение начальной дисперсии приводит к медленному уменьшению прочности материала. Таким образом, существует оптимальное значение начальной дисперсии скоростей мезочастиц, соответствующее максимальной прочности материала.
2. Если исходная дисперсия в материале мала, то откольное разрушение локализуется в очень тонком слое, края откольной трещины оказываются абсолютно ровными. Увеличение дисперсии приводит к увеличению толщины зоны разрушения, края откольной трещины становятся неровными, изрезанными. Таким образом, дисперсия приводит к размыванию фронта ударной волны, что, в свою очередь, приводит к повышению прочности.
3. Если дисперсия достаточно высока, то микротрещины, которые появляются на начальной стадии разрушения, могут спонтанно исчезнуть — дисперсия стимулирует релаксационные процессы в материале.
4. Из Рис. 3 следует, что  $W$  имеет максимум при тех же значениях дисперсии, при которых ширина откольной трещины имеет минимум. Таким образом, критерий откольной прочности дает одинаковый результат с критерием ширины откольной трещины, предложенным в данной работе. Однако, второй критерий обладает значительно большей чувствительностью.

Эти результаты получены из молекулярно-динамического моделирования и они находятся в хорошем согласии с результатами экспериментов [2, 12].

*Автор благодарен Ю. И. Мещерякову за предоставленные экспериментальные данные и полезные обсуждения.*

## Список литературы

- [1] 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.
- [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] *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов*. Ред. Панин, В. Е. Новосибирск: Наука, 1995.

- [4] Allen, M. P. and Tildesley, A. K., *Computer Simulation of Liquids*. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [5] Экштайн, В., *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*. М.: Мир, 1995.
- [6] 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.
- [7] Nagy, I., László, J., and Giber, J., *Z. Phys.*, 1985, **A321**, 221.
- [8] *Molecular Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical systems*. Eds. Ciccotti, G. and Hoover, W. G., North-Holland, Amsterdam, 1986.
- [9] Cochran, S. and Banner, D. *J. Appl. Phys.*, 1977, **48**, 2729.
- [10] Mescheryakov, Y. I., On the fluctuative decay of waves in solids. *Proc. of the XXIV Summer School "Nonlinear Oscillations in Mechanical Systems"*, 1997, St.-Petersburg, Russia, 436–454.
- [11] Chen, D., Al-Hassani, S. T. S., Sarumi, M., and Xiaogang, J., Crack straining-based spall model. *International Journal of Impact Engineering*, 1997, **19**, 107–116.
- [12] 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.
- [13] Kanel, G. I., Razorenov, S. V., Bogatch, A., Utkin, A. V., and Grady, D. E., Simulation of spall fracture of aluminum and magnesium over a wide range of load duration and temperature. *International Journal of Impact Engineering*, 1997, **20**, 467–478.

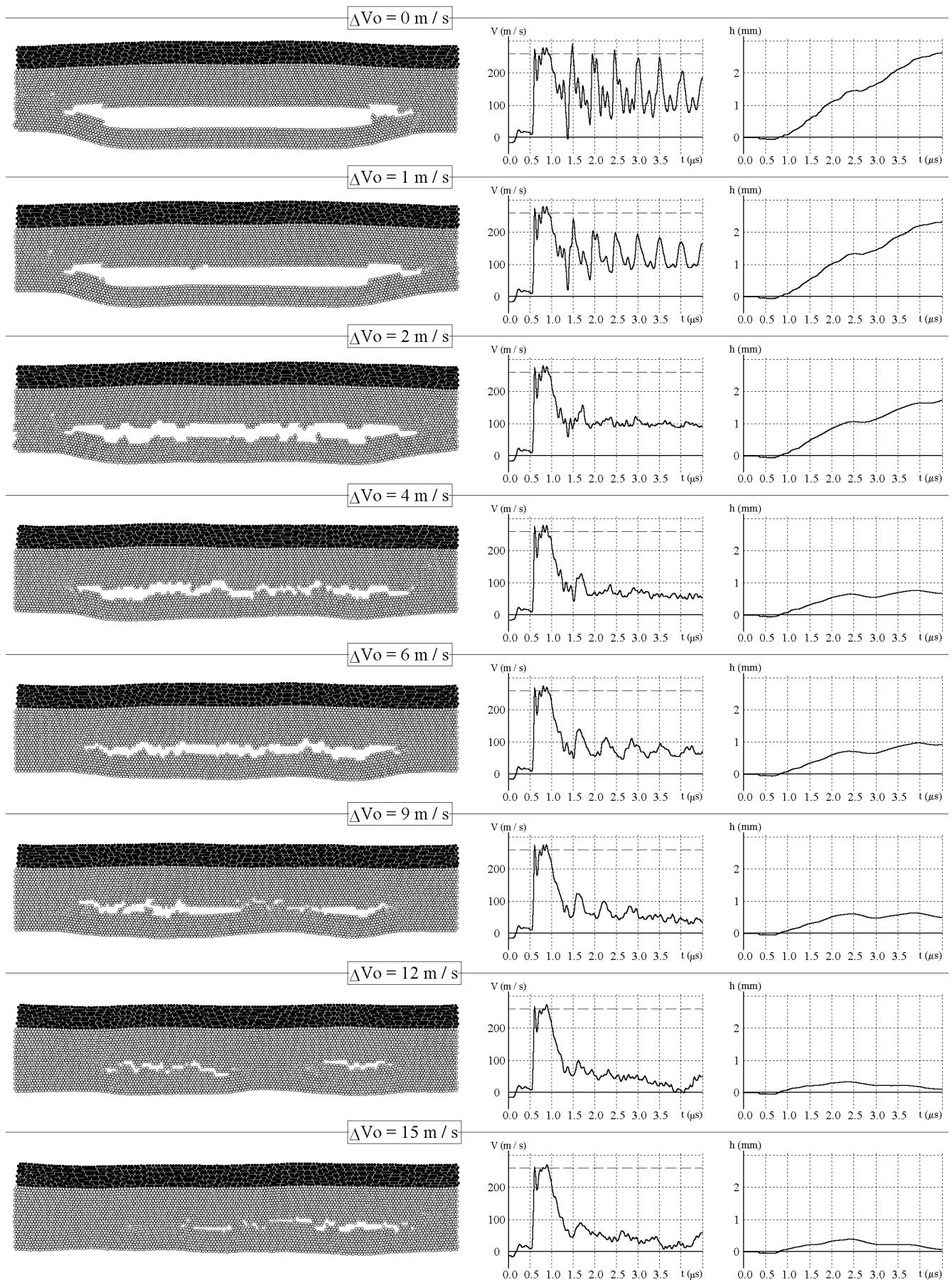


Рис. 4: : Компьютерные эксперименты при  $0 \leq \Delta V_0 \leq 15$  м/с, 5000 частиц.



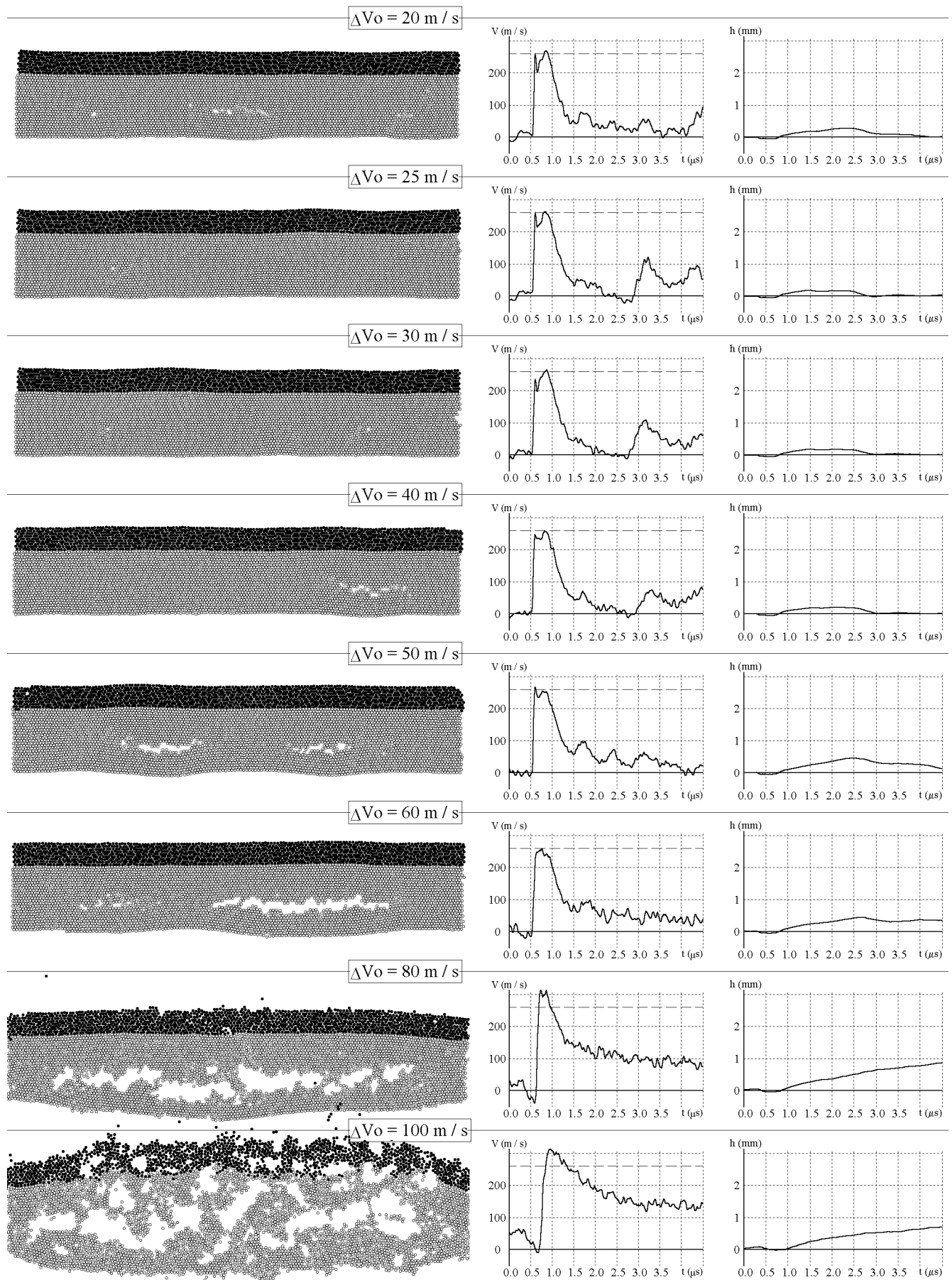


Рис. 5: : Компьютерные эксперименты при  $20 \text{ м/с} \leq \Delta V_0 \leq 100 \text{ м/с}$ , 5000 частиц.

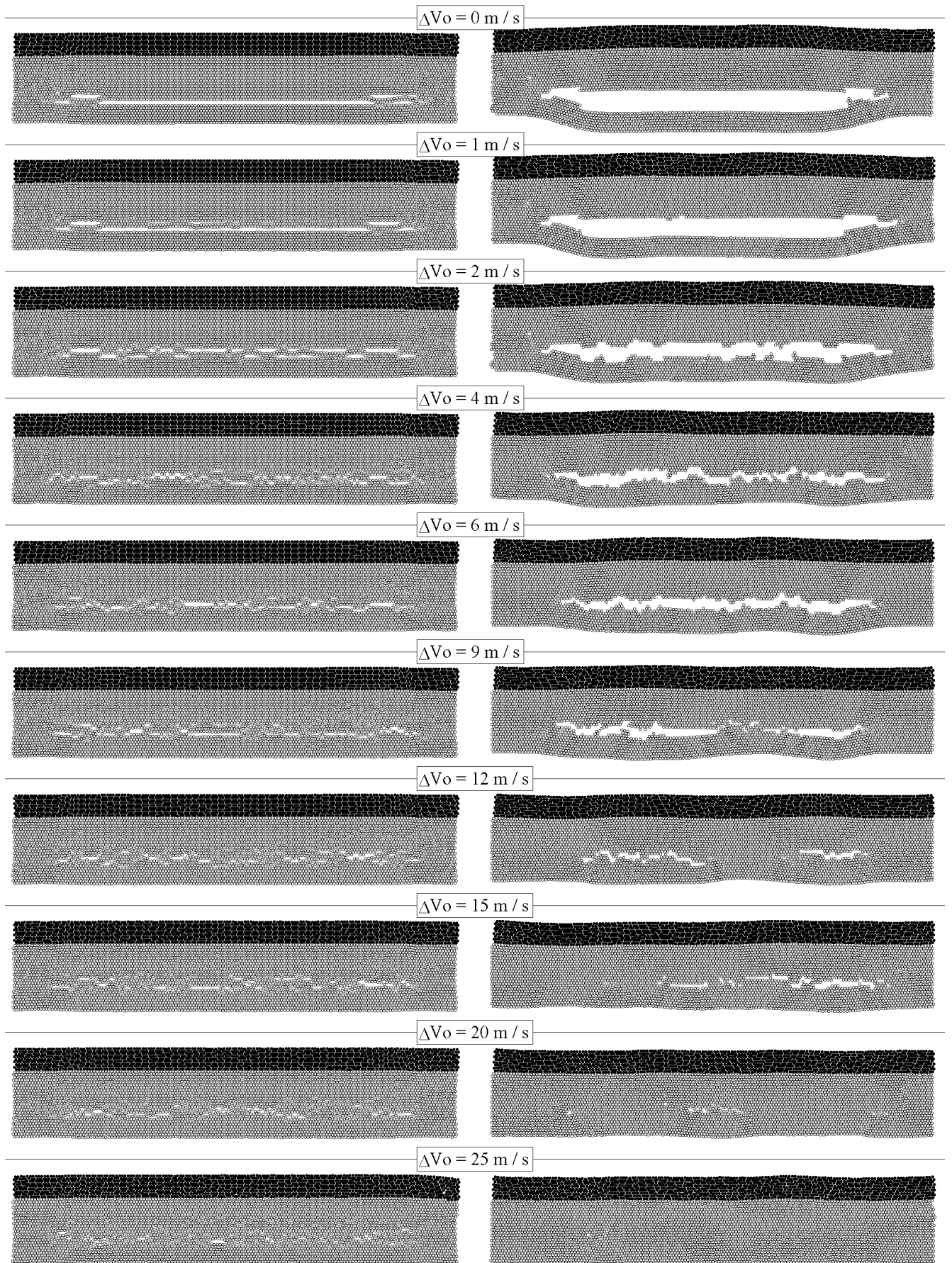


Рис. 6: : Сравнение состояния откольной трещины при  $t = 1.4 \mu\text{s}$  (слева) и при  $t = 4.1 \mu\text{s}$  (справа).

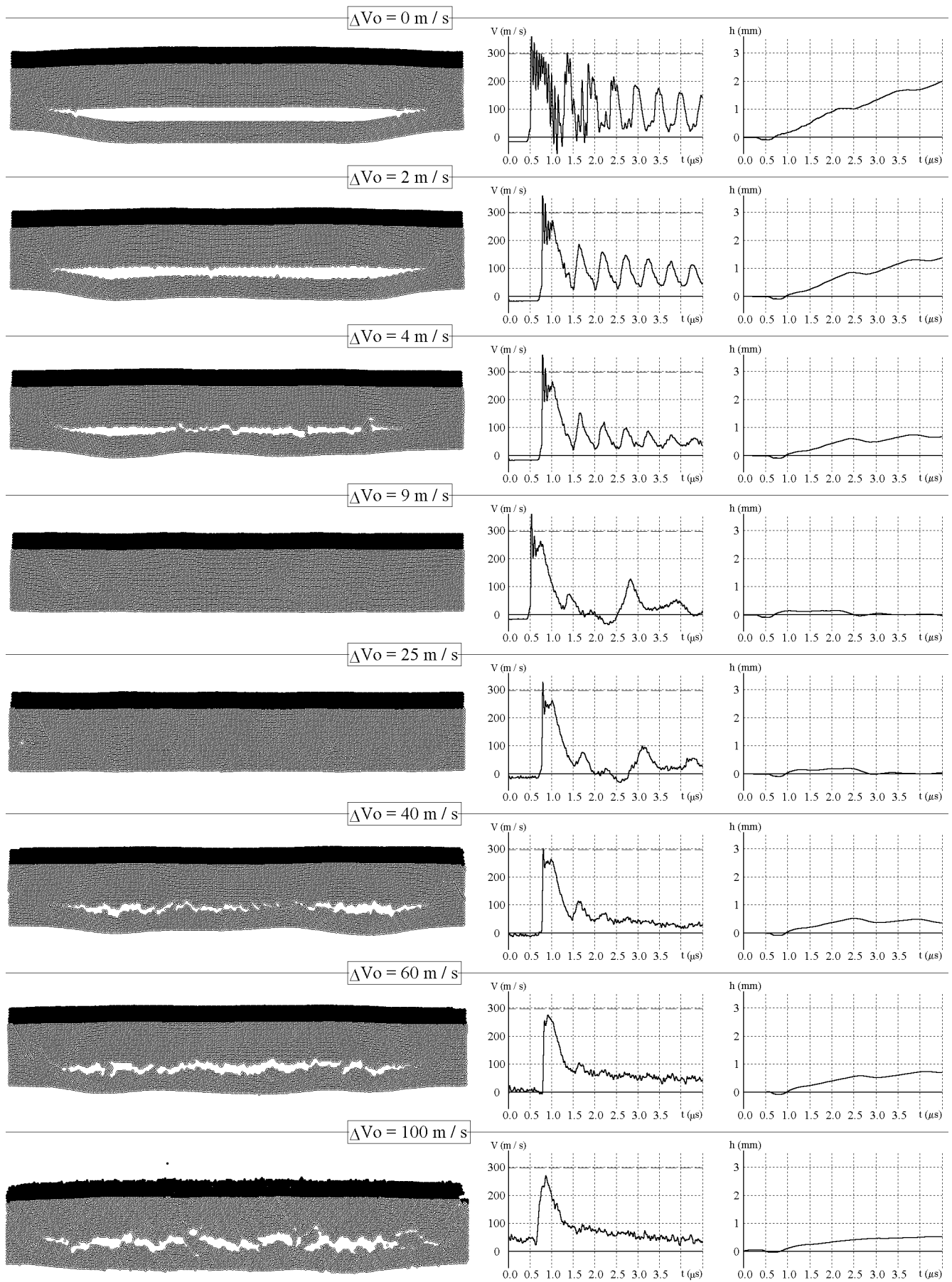


Рис. 7: : Компьютерные эксперименты при  $0 \leq \Delta V_0 \leq 100$  м/с, 20000 частиц.