

УДК 539.3

МНОГОУРОВНЕВЫЙ ПОДХОД ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ

© 2011 г.

С.Г. Псахье

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

sp@ms.tsc.ru

Поступила в редакцию 24.08.2011

Предложен подход к реализации моделей упругости и пластичности на основе метода частиц. В основе подхода лежат уравнения движения и описание взаимодействия обеспечивающих адекватный отклик ансамбля элементов. Предложенный подход открывает возможность моделирования процессов деформации и разрушения на различных масштабных уровнях в рамках единого подхода. Возможности метода иллюстрируются на различных примерах от изучения атомных механизмов деформации до исследования закономерностей поведения блочных геологических сред. В частности, проведенные исследования показали возможность управления режимом смещений в зонах сейсмоактивных разломов. При моделировании на атомном уровне изучен отклик материала в условиях динамического нагружения в широком температурном интервале. Показано, что тепловые флуктуации могут являться причиной генерации областей с локальным изменением структуры.

Ключевые слова: упругость, пластичность, метод частиц, ансамбль элементов, температура, тепловые флуктуации, структура.

Введение

В последние десятилетия методы численного моделирования стали играть существенную роль в механике деформируемого твердого тела. При этом одним из перспективных направлений в современной механике является развитие методов дискретного моделирования [1]. В настоящее время этот подход широко используется для изучения слабосвязанных сред [2], в частности в механике грунтов (soil mechanics). Но его применение при изучении процессов деформации и разрушения в консолидированных средах ограничено, что обусловлено недостаточным развитием математических моделей взаимодействия частиц в подобных средах. Так, до сих пор не удалось избежать влияния упаковки элементов на результаты моделирования. Как правило, эту проблему пытаются обойти привлечением достаточно искусственных методов. Поэтому сегодня одной из наиболее актуальных проблем, требующих решения при использовании дискретного подхода, является создание метода, обеспечивающего описание поведения ансамбля дискретных элементов (частиц), адекватное поведению консолидированных твердых сред с различной реологией.

Предложен новый метод – метод подвижных клеточных автоматов (ПКА). В рамках этого метода получены уравнения движения, которые в

пределе сводятся к уравнениям движения метода молекулярной динамики. Разработан общий подход к построению многочастичных потенциалов взаимодействия дискретных элементов (автоматов), по форме записи аналогичных межатомным потенциалам погруженного атома. Подход основан на вычислении средних значений компонент тензора напряжений в объеме элемента и использовании давления в качестве объемнозависящей составляющей силы взаимодействия элемента с окружением. Для случая изотропной упругопластической среды предложены выражения для сил центрального и тангенциального взаимодействия дискретных элементов (автоматов), которые обеспечивают «макроскопически» изотропный отклик ансамбля элементов даже при использовании регулярной упаковки. Показано, что важным преимуществом предложенного подхода к построению межэлементного взаимодействия является возможность непосредственной реализации в рамках метода ПКА различных реологических моделей. Таким образом, предложенный подход позволяет моделировать процессы деформации и разрушения на различных масштабных уровнях в рамках единого подхода, возможности которого иллюстрируются на различных примерах от изучения атомных механизмов деформации до исследования закономерностей поведения блочных геологических сред.

О возможности релаксации локальных напряжений в земной коре путем инициации смещений по сейсмически активным разломам

Хорошо известно, что земная кора имеет иерархическую блочную структуру, являющуюся результатом геологической эволюции, а также глобальных и локальных деформационных процессов. При этом основные деформации (смещения) в среде под действием локальных полей внутренних напряжений происходят по границам раздела гео-блоков (активным разломам). Проведено комплексное исследование совместного влияния обводнения и вибрационного воздействия на отклик (режим смещений) фрагментов сейсмоактивных разломов. Теоретическое изучение проводилось на основе моделирования методом подвижных клеточных автоматов.

Результаты показали, что комбинированное использование двух указанных факторов позволяет не просто инициировать аномально большие по амплитуде смещения по разлому, но, что не менее важно, реализовать их в относительно плавном режиме сдвиговой ползучести (то есть без динамического спонтанного выделения мощных сейсмических импульсов). Натурные эксперименты, проведенные на полигоне «Листвянка», расположенном в Байкальской рифтовой зоне, совместно со специалистами из Института земной коры СО РАН, подтвердили результаты моделирования. Исследования показали, что контролируемое управление режимом смещений в зонах сейсмоактивных разломов делает возможным реализацию «сейсмически безопасного» способа релаксации локальных концентраторов напряжений путем многократного выделения «избыточной» части накопленной упругой энергии среды относительно малыми порциями.

Полученные результаты, помимо прикладного, имеют и фундаментальное значение, поскольку способствуют пониманию закономерностей динамики накопления необратимых деформаций в разломных зонах в условиях многочисленных низкоамплитудных возмущений напряженного состояния.

О термофлуктуационном формировании локальных структурных изменений в кристалле в условиях динамического нагружения

Многоуровневое описание процессов пластической деформации подразумевает наличие элементарных дефектов. Поэтому одной из фунда-

ментальных проблем физики твердого тела и материаловедения является исследование возможных механизмов формирования локальных структурных искажений и трансформаций атомной структуры. Очевидно, что их зарождение в стабильном кристалле связано с локальной потерей устойчивости кристаллической решетки [1], которая может быть обусловлена термическими, механическими, химическими, радиационными воздействиями либо их комбинациями. Поиск термодинамического параметра, изменение которого определяло бы локальную потерю устойчивости кристаллита, является одной из ключевых задач современной физики пластичности. В связи этим в настоящей работе ставилась задача провести исследование атомных механизмов, ответственных за термофлуктуационное зарождение пластической деформации в материале при динамическом воздействии. Расчеты проводились в широком температурном интервале (до 700 К) и для различных кристаллографических направлений, вдоль которых прикладывалась нагрузка [3]. Моделирование показало возможность термофлуктуационного механизма генерации прекурсорных состояний и зарождения дефектов структуры в материалах с исходно идеальной кристаллической решеткой. Следует отметить, что существует некоторое пороговое значение деформации, при достижении которого происходит практически скачкообразный рост областей локальных структурных изменений. Свойства атомных конфигураций, соответствующих прекурсорным состояниям, во многом подобны свойствам, которые в работах В.Е. Панина ассоциировались с сильновозбужденными состояниями. Полученные результаты важны для изучения природы пластической деформации.

На рис. 1 изображена зависимость потенциальной энергии, приходящейся на атом, от степени растяжения кристаллита. Кривая 1 соответствует случаю $T = 0$ К, 2 – $T = 100$ К, 3 – $T = 300$ К, 4 – $T = 500$ К.

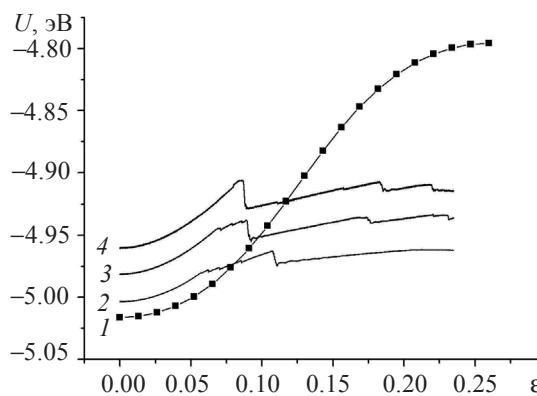


Рис. 1

Работа выполнена в рамках проекта VII.64.1.8 Программы фундаментальных исследований СО РАН, а также при поддержке грантом РФФИ №09-05-00968-а и программой Президиума РАН 11.2.

Список литературы

1. Sibille L., Nicot F., Donze F.V., Darve F. // Int. J.

for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics. 2007. Vol. 31, No 3. P. 457–481.

2. Potyondy D.O., Cundall P.A. // Int. J. of Rock Mechanics and Mining Sciences. 2004. Vol. 41, No 8. P. 1329–1364.

3. Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Lipnitskii F.G. // Physics Letters. A. 2006. Vol. 349. P. 509–512.

A MULTI-LEVEL APPROACH TO MODELING DEFORMATION AND FAILURE

S.G. Psakhie

An approach to the implementation of the models of elasticity and plasticity based on the particle method is presented. The method is based on equations of motion and the description of interaction providing an adequate response of the element ensemble. The introduced approach makes it possible to model deformation and failure processes on various scale levels in the frame of the universal approach. In the present paper, the potential of the approach is illustrated using examples varying from the study of atomic mechanisms of deformation to the investigation of the laws of behavior of block geological media. In particular, the investigation showed that it is possible to control the displacement modes in active seismic zones. The response of materials under dynamic loading in a wide temperature range is investigated using the atomic-level modeling. Thermal fluctuations are shown to cause generation of zones of local structural changes.

Keywords: elasticity, plasticity, method of particles, ensemble of elements, temperature, thermal fluctuations, structure.