

На правах рукописи

Кривцов Антон-Иржи Мирославович

Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой

Специальность 01.02.04 — “Механика деформируемого твердого тела”

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург
2002

Работа выполнена на кафедре “Теоретическая механика”
Санкт-Петербургского государственного технического университета

- Научный консультант — доктор физико-математических наук,
профессор Жилин Павел Андреевич
- Официальные оппоненты — доктор физико-математических наук,
профессор Блехман Илья Израилевич
- доктор физико-математических наук,
профессор Бригаднов Игорь Альбертович
- доктор физико-математических наук,
профессор Пальмов Владимир Александрович
- Ведущая организация — Институт прикладной математики
им. М. В. Келдыша (Москва)

Защита состоится 23 апреля 2002 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 002.075.01 при Институте проблем машиноведения РАН по адресу: 199178, Санкт Петербург, В.О., Большой проспект 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ Института проблем машиноведения РАН.

Автореферат разослан “ ____ ” марта 2002 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор технических наук

В. В. Дубаренко

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Нарушение континуальности материалов при сильном деформировании и разрушении создает серьезные сложности в описании подобных процессов в рамках классической механики сплошной среды. С другой стороны, развитие технологий, позволяющих изучать микроструктуру деформируемых тел, привело к накоплению фактов, свидетельствующих о чрезвычайно высокой роли внутренней структуры материала в процессах, сопровождающих его деформирование. Возросший в последнее десятилетие интерес к механическим свойствам нанообъектов потребовал еще более серьезного внимания к влиянию внутренней структуры материала на его механическое поведение. Особый интерес в этой области связан с появлением технологической возможности не только наблюдать и измерять элементы внутренней структуры твердых тел, но и оказывать влияние на эту структуру, а в случае нанотехнологий и создавать необходимые структурные элементы на микроуровне. В этой ситуации особую актуальность приобретает развитие аналитических и компьютерных моделей, которые бы могли адекватно описать механические свойства подобных сред и структур.

Бурное развитие вычислительной техники позволило на новом уровне вернуться к проблеме описания сред с микроструктурой, дополняя компьютерным моделированием решение проблем, недоступных для аналитического решения. Компьютерное моделирование становится важным звеном, занимающим промежуточное положение между теорией и реальным экспериментом. Основываясь на теоретических моделях, компьютерный эксперимент осуществляется в результате численного расчета, где сложность модели может сколь угодно увеличиваться по мере развития вычислительных средств, добиваясь все более точного соответствия условиям экспериментальных исследований. Таким образом, с одной стороны, повышаются возможности теоретических исследований, а, с другой стороны, появляется возможность многократно дублировать дорогостоящие экспериментальные исследования. Не имея возможности существовать независимо от аналитической теории, создающей расчетную модель, и эксперимента, обеспечивающего соответствие между моделью и реальностью, компьютерное моделирование оказывается важным звеном объединяющим теорию и эксперимент.

В данной ситуации большие перспективы могут быть связаны с использованием метода частиц, который в последние десятилетия широко применялся в различных областях химии и физики, однако относительно мало использовался для моделирования механического поведения твердых тел. Являясь типичным методом компьютерного моделирования, по мере наращивания количественных возможностей вычислительной техники, метод

частиц позволяет получать качественно новые результаты, за счет количественной сложности компьютерной модели. Как принципиально дискретный метод, он не имеет недостатков континуальных моделей, проявляющихся при нарушении сплошности вещества или в результате дискретности его внутренней структуры. В применении и развитии метода частиц для моделирования процессов деформирования и разрушения твердых тел с микроструктурой и состоит основная задача данной диссертационной работы.

Методика исследований. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой в данной работе исследуется методом частиц, который состоит в представлении вещества совокупностью взаимодействующих материальных точек или твердых тел, описываемых классическими уравнениями движения. Деформирование твердых тел в рамках нелинейной термоупругости рассматривается аналитически, при исследовании процессов разрушения уравнения движения частиц решаются численно. Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов метода частиц является метод молекулярной динамики, на протяжении последних десятилетий интенсивно используемый для исследования физико-химических свойств материалов. В классической молекулярной динамике в качестве частиц выступают атомы и молекулы, составляющие материал. Для описания процессов в макроскопических объектах уже невозможно придерживаться молекулярной концепции, и частицы интерпретируются как элементы более крупного масштабного уровня (мезоуровня), такие, как, например, зерна материала. Такой подход начал интенсивно развиваться в последние годы в механике как альтернатива континуальному описанию материалов при сильном деформировании и разрушении.

Цель работы. Цель данной диссертационной работы состоит в применении и развитии метода частиц для аналитического и компьютерного моделирования механических процессов в твердых телах. Аналитическое моделирование применяется в задачах деформирования в рамках нелинейной термоупругости. Компьютерное моделирование используется для исследования процессов неупругого деформирования и разрушения, опираясь при этом на результаты аналитического моделирования.

Научную новизну составляют следующие **результаты работы, выносимые на защиту.**

1. В длинноволновом приближении решена задача о нелинейном упругом деформировании бесконечной монокристаллической упаковки частиц, получены как определяющие уравнения общего вида, так и для частных случаев геометрически нелинейного материала и материала Сетха. Выведены определяющие уравнения для поликристаллической упаковки частиц при нелинейном упругом деформировании в виде ряда по

степеням главных инвариантов тензора деформаций.

2. Развита методика, позволяющая учитывать хаотическое движение частиц при моделировании вблизи точки разрушения, получены уравнения состояния, позволяющие описать термодинамические процессы при сильном растяжении кристалла вплоть до точки разрыва.
3. Исследована задача об упругом деформировании конечного кристалла, получены зависимости его упругих модулей от размеров кристалла. Полученные результаты позволяют оценить погрешность дискретизации при использовании метода частиц, а также позволяют описывать аномалии механических характеристик наноразмерных объектов.
4. Предложена специальная форма уравнений движения твердого тела, удобная для описания движения больших систем взаимодействующих твердых тел для использования в методе частиц.
5. На основании аналитического решения перечисленных выше задач нелинейной термоупругости для различных упаковок частиц разработана методика численного моделирования методом частиц макроскопических процессов в твердых телах с микроструктурой. На основе данной методики исследован ряд конкретных задач о сильном деформировании и разрушении твердых тел.
6. Численно исследована задача об откольном разрушении при плоском ударном взаимодействии двух пластин. Показано, что в зоне откольного разрушения дисперсия скоростей частиц имеет локализованный максимум. Доказано, что, несмотря на удвоение массовой скорости на свободной поверхности мишени, возрастания дисперсии на свободной поверхности не происходит.
7. Моделирование откольного разрушения позволило дать объяснение экспериментальному факту взаимосвязи откольной прочности и дисперсии скоростей частиц. Показано, что увеличение дисперсии приводит к размыванию фронта ударной волны и к интенсификации релаксационных процессов, что в конечном итоге приводит к повышению прочности материала.
8. Разработана методика создания поликристаллических компьютерных материалов с различными механическими свойствами. Решена задача об одноосном квазистатическом сжатии поликристаллических образцов, получены зависимости прочностных характеристик от структуры материала.
9. Исследована задача об откольном разрушении в поликристаллическом материале, выявлена зависимость характера разрушения и откольной прочности от пористости материала. Показано разделение фронта на упругий предвестник и пластический фронт, исследована зависимость данного эффекта от величины пористости и скорости ударника.

В совокупности полученные результаты позволили разработать новый подход к анализу деформирования и разрушения твердых тел с микроструктурой.

Достоверность полученных результатов. Достоверность результатов достигается использованием апробированных физических моделей и применением строгих математических методов; сравнением результатов аналитических исследований и численных расчетов; использованием при компьютерном моделировании тестовых задач, допускающих точное аналитическое решение; применением современных методов и вычислительных средств; сравнением результатов моделирования с экспериментальными данными.

Практическая значимость работы. Разработанные методы моделирования могут эффективно использоваться для анализа деформирования и разрушения твердых тел с микроструктурой, начиная от нанообъектов, и заканчивая макроскопическими телами. Предложенные методы компьютерного расчета могут использоваться для проведения компьютерных экспериментов, заменяя тем самым значительную часть дорогостоящих натуральных экспериментов. Практическая значимость работы подтверждается ее успешным применением для решения прикладных задач, таких как откольное разрушение при плоском ударном взаимодействии пластин, пробивание пластин ударниками различной формы, динамическое взаимодействие инструмента с материалом при вибрационном сверлении, моделирование механических свойств мелкодисперсных порошков.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на семинарах кафедры “Теоретическая механика” СПбГТУ, Института проблем машиноведения РАН (С.-Петербург), Института прикладной математики им. М. В. Келдыша (Москва), кафедры Электроники и электромагнетизма Университета Севильи (Испания), Инженерного департамента Абердинского университета (Великобритания), а также на всесоюзных и международных конференциях: “Асимптотические методы в механике” (С.-Петербург 1994), “Инновационные наукоемкие технологии для России” (С.-Петербург 1995), ICIAM’95 (Гамбург), GAMM’96 (Прага), “Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем” (С.-Петербург 1996, 1997, 1998), 2nd ENOC (Прага 1996), “Длительная прочность и неупругое деформирование материалов и элементов конструкций при сложных режимах термомеханического нагружения” (С.-Петербург 1996), GAMM’97 (Регенсбург), EUROMECH 362 (Манчестер 1997), 3rd EUROMECH Solid Mechanics Conference (Стокгольм 1997), SMiRT 14 (Леон 1997), GAMM’98 (Бремен), “Nondestructive Testing and Computer Simulations in Sciences and Engineering” (С.-Петербург 1998), HVIS’98 (Хантсвил, США), ICIAM’99 (Эдинбург), DETC99/VIB (Лас Вегас), EURODYN’99 (Прага), NOMS’99

(С.-Петербург), АРМ'2000 (С.-Петербург 2000), АРМ'2001 (С.-Петербург), EUROМЕСН 425 (Абердин, Великобритания 2001), VIII Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Пермь 2001).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 55 научных работ. Список основных публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Работа содержит 234 страницы, 69 рисунков, список литературы содержит 332 наименования.

Содержание работы

Во введении дана общая характеристика работы, обоснована актуальность исследования деформирования и разрушения твердых тел с микроструктурой, описана методика исследований. Обсуждаются преимущества метода частиц для решения поставленных в работе задач по сравнению с континуальными подходами. В частности указывается, что метод частиц требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала: роль определяющих уравнений в методе частиц выполняет потенциал взаимодействия, являющийся функцией расстояния между частицами, что значительно проще, чем операторная зависимость от многих скалярных, векторных и тензорных величин в определяющих уравнениях механики континуума. Не являясь континуальным, метод частиц позволяет более естественно описывать процессы, в которых происходит нарушение сплошности вещества, в частности не требуются специальных критериев разрушения — снижение концентрации частиц в некоторой области пространства, полученное в результате интегрирования уравнений движения, свидетельствует о разрушении материала. Метод частиц позволяет естественным образом устранить континуальное звено между дискретностью микроструктуры реальных веществ и дискретностью численных методов, используемых для решения уравнений, описывающих деформирование и разрушение твердых тел. Вместе с тем отмечается и ряд недостатков метода частиц, один из которых состоит в повышенном, по сравнению с континуальными методами, требовании к мощности вычислительных систем, при использовании данного метода в описании макроскопических процессов.

Во введении проведен обзор литературы, дана краткая история развития метода частиц применительно к описанию физико-механических процессов в твердых телах. Указывается, что первые работы, использующие метод молекулярной динамики, были опубликованы в начале шестидесятых годов, затем количество работ в рассматриваемой области постепенно повышалось, следуя за прогрессом компьютерных технологий, достигнув апогея в последнее десятилетие, когда возможности вычислительной техники позволили использовать при моделировании достаточное число частиц

для описания процессов деформирования и разрушения одновременно на нескольких масштабных уровнях.

Первая глава посвящена математическому моделированию нелинейного деформирования тел с кристаллической структурой. В силу регулярности кристаллических решеток многие соотношения, связывающие параметры микроструктуры с макроскопическими параметрами деформирования удается получить аналитически. С одной стороны, подобные аналитические соотношения представляют самостоятельный интерес для теоретического описания деформирования кристаллических твердых тел. С другой стороны, они необходимы для постановки задач компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения методом частиц, так как в основе этого метода лежит представление твердого тела с помощью различных упаковок частиц, из которых кристаллические являются наиболее широко используемыми. В основном в данной главе изучаются монокристаллические структуры, однако, также рассматривается осреднение нелинейных определяющих уравнений, позволяющее описывать деформирование поликристаллических материалов.

Глава состоит из пяти параграфов. **Первый параграф** вводный, в нем описываются основные предположения, лежащие в основе дальнейших построений, даются краткие сведения о типах кристаллических решеток и видах взаимодействия между частицами.

В параграфе 1.2 из уравнений движения частиц на основе длинноволнового приближения получаются линейные макроскопические соотношения упругости. Для сложной кристаллической решетки выводится система тензорных уравнений для нахождения тензора жесткости.

$${}^2\underline{\underline{C}}^\gamma \cdot {}^3\underline{\underline{U}}_\gamma - \sum_\beta {}^2\underline{\underline{C}}^\gamma \cdot {}^3\underline{\underline{U}}_\beta = {}^3\underline{\underline{C}}^\gamma; \quad \beta, \gamma = 1, 2, \dots, n, \quad (1)$$

где β, γ и n — номера и число частиц в элементарной ячейке, ${}^2\underline{\underline{C}}^\gamma$, ${}^3\underline{\underline{C}}^\gamma$ — известные тензорные коэффициенты, ${}^3\underline{\underline{U}}_\gamma$ — неизвестные тензорные переменные (3-го ранга). После решения системы (1) тензор жесткости ${}^4\underline{\underline{C}}$ определяется как

$${}^4\underline{\underline{C}} = {}^4\underline{\underline{C}}_0 - 2 \sum_\beta {}^3\underline{\underline{C}}^\beta \cdot {}^3\underline{\underline{U}}_\beta, \quad {}^4\underline{\underline{C}}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_\alpha \sum_{\beta, \gamma} C_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma. \quad (2)$$

Для простой кристаллической решетки ${}^4\underline{\underline{C}} \equiv {}^4\underline{\underline{C}}_0$. Формулы для коэффициентов:

$$\begin{aligned} {}^2\underline{\underline{C}}_\beta^\gamma &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_\alpha C_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma, & {}^2\underline{\underline{C}}^\gamma &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_\beta {}^2\underline{\underline{C}}_\beta^\gamma, & C_{\alpha\beta}^\gamma &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V_*} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} f_\beta^\gamma(r) \right) \Big|_{r=a_{\alpha\beta}^\gamma}, \\ {}^3\underline{\underline{C}}_\beta^\gamma &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_\alpha C_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma \underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma, & {}^3\underline{\underline{C}}^\gamma &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_\beta {}^3\underline{\underline{C}}_\beta^\gamma, \end{aligned}$$

где α — номер ячейки (пробегают все ячейки, с которыми взаимодействует данная); $\underline{a}_{\alpha\beta}^\gamma$ — вектор, проведенный из частицы γ данной ячейки к частице β ячейки α ; $f_\beta^\gamma(r)$ — сила взаимодействия между частицами β и γ ; V_* — объем элементарной ячейки. Проводится сравнение полученных уравнений с имеющимися в литературе.

Параграф 1.3 посвящен получению нелинейных макроскопических уравнений для кристаллических упаковок частиц. Используется следующая модель: частицы формируют идеальную простую кристаллическую решетку; взаимодействие осуществляется посредством парных центральных сил; каждая частица взаимодействует с ограниченным числом соседей; силы и деформации нелинейны; справедливо длинноволновое приближение. Для отсчетной и актуальной конфигураций, соответственно, используются следующие обозначения: \underline{r} , \underline{R} — вектор положения; \underline{a}_α , \underline{A}_α — радиус-вектор узла α ; v_* , V_* — объем элементарной ячейки; $\overset{\circ}{\nabla}$, ∇ — оператор Гамильтона. Для краткости ограничимся ниже уравнениями статики, уравнения динамики могут быть получены заменой массовых сил инерционными слагаемыми. Уравнения равновесия частицы имеют вид

$$\sum_\alpha \underline{F}_\alpha + \underline{f} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{1}{2} \sum_\alpha (\underline{F}_\alpha + \underline{F}_{-\alpha}) + \underline{f} = 0, \quad (3)$$

где \underline{F}_α — воздействие атома α , \underline{f} — внешнее воздействие; узлы нумеруются относительно данной частицы, причем $\underline{a}_{-\alpha} = -\underline{a}_\alpha$. В материальном представлении $\underline{F}_\alpha = \underline{F}_\alpha(\underline{r})$ использование длинноволнового приближения $\underline{a}_\alpha \ll \underline{r}$ дает

$$\underline{F}_{-\alpha}(\underline{r}) = -\underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) \approx -\underline{F}_\alpha(\underline{r}) + \underline{a}_\alpha \cdot \overset{\circ}{\nabla} \underline{F}_\alpha(\underline{r}),$$

что позволяет записать уравнения (3) в виде макроскопического уравнения равновесия в форме Пиола

$$\overset{\circ}{\nabla} \cdot \underline{\underline{P}} + \rho_0 \underline{k} = 0; \quad \underline{\underline{P}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2v_*} \sum_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{F}_\alpha, \quad \underline{k} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{m} \underline{f}, \quad \rho_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{v_*}, \quad (4)$$

где $\underline{\underline{P}}$ — тензор напряжений Пиола, \underline{k} — вектор распределенных массовых сил, ρ_0 — плотность среды в отсчетной конфигурации. Использование пространственного представления $\underline{F}_\alpha = \underline{F}_\alpha(\underline{R})$ позволяет получить аналогичное уравнение равновесия среды в форме Коши

$$\nabla \cdot \underline{\underline{T}} + \rho \underline{k} = 0; \quad \underline{\underline{T}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \underline{A}_\alpha \underline{F}_\alpha, \quad \rho \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{V_*}, \quad (5)$$

где $\underline{\underline{T}}$ — тензор напряжений Коши, ρ — плотность в актуальной конфигурации. Данный подход позволяет дать микроструктурное истолкование

различным тензорам напряжений, используемым в литературе:

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{T}} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \underline{A}_{\alpha} \underline{A}_{\alpha} && \text{— Тензор Коши,} \\
\underline{\underline{T}}_{(o)} &= \frac{1}{2v_*} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \underline{A}_{\alpha} \underline{A}_{\alpha} && \text{— (Гамель и др.),} \\
\underline{\underline{P}} &= \frac{1}{2v_*} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{A}_{\alpha} && \text{— Тензор Пиола,} \\
\underline{\underline{\tilde{T}}} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} && \text{— Энергетический тензор,} \\
\underline{\underline{T}}^* &= \frac{1}{2v_*} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} && \text{— 2-ой тензор Пиола,}
\end{aligned}$$

где $\Phi_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{A}_{\alpha} \cdot \underline{F}_{\alpha} / A_{\alpha}^2$. В результате определяющее уравнение кристаллической решетки при нелинейном упругом деформировании может быть записано в виде

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{T}} &= \frac{1}{v_* |\underline{G}|^{1/2}} (\underline{R} \overset{\circ}{\nabla}) \cdot \underline{\underline{\Phi}}(\underline{G}) \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}), && \underline{G} = (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}) \cdot (\underline{R} \overset{\circ}{\nabla}), \\
\underline{\underline{\Phi}}(\underline{G}) &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \Phi(\underline{a}_{\alpha} \cdot \underline{G} \cdot \underline{a}_{\alpha}) \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}, && \Phi(r^2) \stackrel{\text{def}}{=} \Pi'(r)/r,
\end{aligned}$$

где \underline{G} — мера деформации Коши-Грина, $\Pi(r)$ — потенциал взаимодействия двух частиц, разделенных расстоянием r .

В параграфе рассмотрены упрощенные определяющие соотношения, справедливые для приближений, часто используемых в теории упругости. Так, в приближении линейной теории упругости данные уравнения приобретают вид (при отсутствии напряжений в отсчетной конфигурации)

$$\underline{\underline{\tau}} = {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad {}^4\underline{\underline{C}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{v_*} \sum_{\alpha} \Phi'(a_{\alpha}^2) \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}} = (\nabla \underline{u})^s, \quad (6)$$

где $\underline{\underline{\tau}}$, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ — тензоры напряжений и деформаций линейной теории, ${}^4\underline{\underline{C}}$ — тензор жесткости, \underline{u} — вектор перемещений точек среды. В случае изотропии тензора жесткости или для поликристаллического материала уравнение (6) примет вид

$$\underline{\underline{\tau}} = C \left((\text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}}) \underline{\underline{E}} + 2\underline{\underline{\varepsilon}} \right), \quad C \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{30} \sum_{\alpha} a_{\alpha} B_{\alpha}. \quad (7)$$

Данная формула справедлива для трехмерных кристаллических решеток, соответствующий коэффициент Пуассона равен 1/4. В приближении геометрически нелинейного материала определяющие уравнения принимают вид

$$\underline{\underline{T}} = |\underline{G}|^{-1/2} (\underline{R} \overset{\circ}{\nabla}) \cdot ({}^4\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}) \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}), \quad (8)$$

где $\underline{\underline{\varepsilon}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (\underline{G} - \underline{E})$ — тензор конечной деформации Коши-Грина, ${}^4\underline{\underline{C}}$ — тензор жесткости линейной теории. Уравнение (8) может быть записано в более

простой форме с использованием переменного тензора жесткости $\underline{\underline{4C'}}$

$$\underline{\underline{T}} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{\underline{4C'}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad \underline{\underline{4C'}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} B_{\alpha} \underline{\underline{A}}_{\alpha} \underline{\underline{A}}_{\alpha} \underline{\underline{a}}_{\alpha} \underline{\underline{a}}_{\alpha}. \quad (9)$$

В случае изотропии тензора жесткости или для поликристаллического материала уравнение (8) примет вид

$$\underline{\underline{T}} = C |\underline{\underline{F}}|^{-1/2} \underline{\underline{F}} \cdot \left((\text{tr } \underline{\underline{\varphi}}) \underline{\underline{E}} + 2\underline{\underline{\varphi}} \right), \quad \underline{\underline{F}} \stackrel{\text{def}}{=} (\underline{\underline{R}} \overset{\circ}{\nabla}) \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \underline{\underline{R}}), \quad \underline{\underline{\varphi}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (\underline{\underline{F}} - \underline{\underline{E}}),$$

где коэффициент жесткости определяется формулой (7).

Параграф 1.4 посвящен выделению изотропной части определяющих уравнений. Кристаллы по своей природе анизотропны, однако реальные вещества чаще встречаются в виде поликристаллов, механические свойства которых осреднены по всем направлениям. Кроме того, использование поликристаллических упаковок частиц необходимо для моделирования методом частиц изотропных материалов. Интерес к рассматриваемому вопросу вызван еще и тем, что его решение позволяет значительно упростить определяющие уравнения монокристалла, сохраняя при этом имеющуюся нелинейную специфику. В параграфе получены формулы, позволяющие определить плотность внутренней энергии поликристаллической упаковки через главные инварианты тензора деформации:

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2v_*} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+d-2)!!} U_n K_n(\underline{\underline{\varepsilon}}), \quad U_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2^{n-1}}{n!} \sum_{\alpha} U^{(n)}(a_{\alpha}^2) a_{\alpha}^{2n}, \quad (10)$$

где \mathcal{U} — энергия деформирования, приходящаяся на единицу объема; $d = 1, 2, 3$ — размерность пространства, $U(r^2) \stackrel{\text{def}}{=} 2\Pi(r)$ — величина, пропорциональная потенциалу взаимодействия; $U^{(n)}$ — производная порядка n от функции по ее аргументу. Коэффициенты U_n в (10) определяются исключительно потенциалом взаимодействия и геометрией решетки, величины $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ в (10), напротив, являются функциями исключительно тензора конечной деформации Коши-Грина $\underline{\underline{\varepsilon}}$ и могут быть определены по формуле

$$K_n = 2^n \frac{d^n}{dx^n} K(\underline{\underline{\varepsilon}}x) \Big|_{x=0}, \quad K(\underline{\underline{\varepsilon}}x) \stackrel{\text{def}}{=} \exp \left(-\frac{1}{2} \text{tr} \ln(\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\varepsilon}}x) \right). \quad (11)$$

Производящая функция $K(\underline{\underline{\varepsilon}}x)$ может быть представлена через главные инварианты I_k тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$ формулой

$$K(\underline{\underline{\varepsilon}}x) = \left(\sum_{k=0}^d I_k (-x)^k \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (12)$$

что позволяет выразить величины K_n , а следовательно и энергию деформирования поликристалла, через главные инварианты тензора деформации.

В параграфе 1.5 развит подход, основанный на разделении быстрых и медленных движений, позволяющий учитывать хаотическое движение частиц при моделировании в случаях, когда использование подходов, основанных на методах статистической физики оказывается слишком сложным, например, вблизи точки разрушения. Предлагаемый подход удобен для определения термодинамических величин в ходе моделирования. При подобном подходе удастся ограничиться рассмотрением только трех термодинамических величин — давление, объем и тепловая энергия, что достаточно для описания быстрых ударных процессов, при которых явлениями, связанными с теплопроводностью можно пренебречь. Рассмотрим продольные колебания в одномерной цепочке, содержащей одинаковые частицы, взаимодействующие посредством потенциальной силы с соседними частицами. Уравнения движения имеют вид

$$m\ddot{u}_n = \Phi_n, \quad \Phi_n \stackrel{\text{def}}{=} F_{n+1} - F_n, \quad F_n = -f(a + \Delta_n), \quad \Delta_n \stackrel{\text{def}}{=} u_n - u_{n-1}.$$

Здесь n — индекс, пробегающий целые значения от 1 до N , где N — число частиц в цепочке; u_n — перемещение частицы; F_n — сила, действующая на частицу $n - 1$ со стороны частицы n ; функция f определяет силу взаимодействия между двумя частицами; a — равновесное расстояние между частицами в цепочке. Используются периодические граничные условия. В положении равновесия цепочка может быть сжата или растянута, то есть равновесная сила взаимодействия не обязательно равна нулю. Введем оператор осреднения

$$\overline{\varphi_n(t)} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_n(t) \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{T\Lambda} \int_{t-T/2}^{t+T/2} \left(\sum_{k=n-\Lambda/2}^{n+\Lambda/2} \varphi_k(\tau) \right) d\tau. \quad (13)$$

Согласно (13), осреднение проводится как по времени, так и по координате. Период осреднения T и интервал осреднения Λ выбираются так, чтобы

$$T_{min} \ll T \ll T_{max}, \quad 1 \ll \Lambda \ll N, \quad (14)$$

где T_{min} и T_{max} , соответственно, минимальный и максимальный период колебаний в системе. Любая величина может быть представлена в виде суммы медленной (осредненной) и осцилляционной компонент

$$\varphi_n(t) = \overline{\varphi_n(t)} + \widetilde{\varphi_n(t)}, \quad \text{где} \quad \widetilde{\varphi_n(t)} \stackrel{\text{def}}{=} \varphi_n(t) - \overline{\varphi_n(t)}. \quad (15)$$

Считается, что для осредненных величин может использоваться длинноволновое приближение, что позволяет для них получить классические макроскопические уравнения движения. Для макроскопического давления p и

тепловой энергии U_T с использованием вириального преобразования могут быть получены следующие выражения

$$p = \langle f(V + \widetilde{\Delta}_n) \rangle, \quad U_T = -\frac{1}{2} \langle f(V + \widetilde{\Delta}_n) \widetilde{\Delta}_n \rangle + \langle \Pi(V + \widetilde{\Delta}_n) - \Pi(V) \rangle,$$

где $V \stackrel{\text{def}}{=} \langle a + \Delta_n \rangle$ — осредненный удельный объем, Π — потенциал взаимодействия частиц, f — соответствующая сила взаимодействия. Предположение, что осцилляционная компонента удельного объема мала по сравнению с осредненной, позволяет разложить полученные соотношения в ряды по малому параметру $\widetilde{\Delta}_n$, что в первом приближении дает уравнение состояния Ми-Грюнайзена

$$p_T = \frac{1}{V} \Gamma(V) U_T, \quad \Gamma(V) \stackrel{\text{def}}{=} V \frac{f_2(V)}{f_1(V)}, \quad f_k(V) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{d^k}{dV^k} f(V), \quad (16)$$

где $\Gamma(V)$ — безразмерный коэффициент Грюнайзена. Уравнение Ми-Грюнайзена хорошо описывает состояние цепочки в условиях сжатия и слабого растяжения, однако при сильном растяжении оно теряет смысл, так как коэффициент Грюнайзена обращается в бесконечность. Для того чтобы устранить этот эффект требуется учет второго приближения, что позволяет получить уравнение состояния

$$p_T = 2f_2(V) \frac{\sqrt{f_1^2(V) + 9f_3(V)U_T} - f_1(V)}{9f_3(V)}, \quad (17)$$

справедливое при сильном растяжении вплоть до разрыва цепочки, что особенно важно для описания процессов откольного разрушения.

Вторая глава посвящена аналитическому рассмотрению сред с усложненными свойствами. **В первом параграфе** главы исследуются свойства конечных кристаллических упаковок частиц в сравнении с неограниченными кристаллами, рассмотренными в первой главе. Исследуется влияние масштабного эффекта на механические свойства модели. Анализ влияния дискретности атомарного описания на значения механических характеристик необходим для определения минимального количества частиц для достижения заданной точности расчетов. С другой стороны, данный вопрос имеет приложения к наномеханике, позволяя ответить на вопрос, насколько дискретность структуры нанообъектов влияет на их механические свойства.

Рассмотрим двумерный монокристалл, изображенный на Рис. 1, имеющий бесконечную длину в направлении x и $N \geq 2$ атомарных слоев в направлении y . Каждый атом взаимодействует только с ближайшими соседями по кристаллической решетке, как показано на Рис. 1. К атомам на торцах кристалла приложены постоянные растягивающие силы Q . Важным

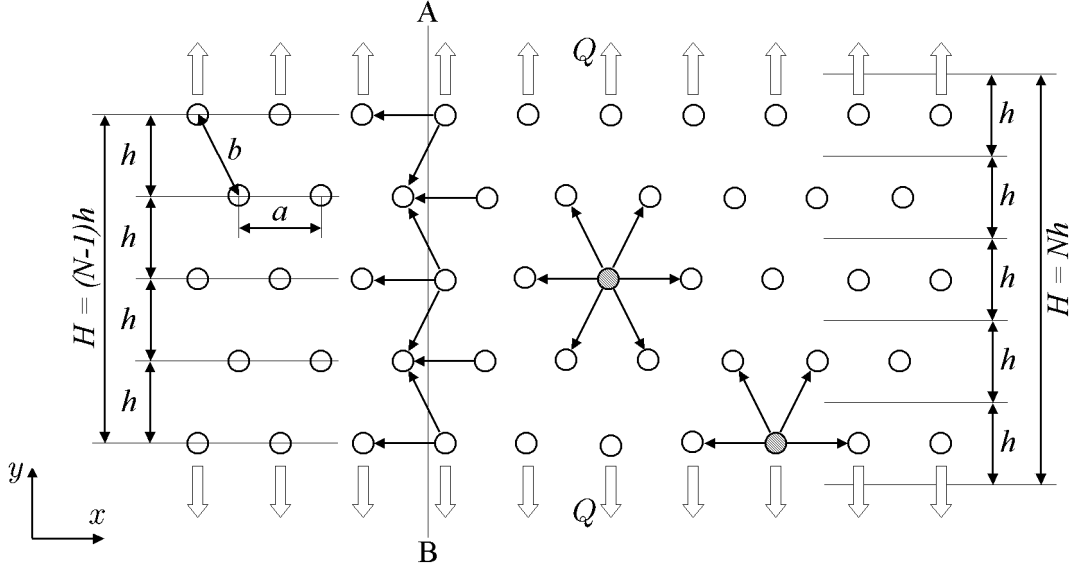


Рис. 1: Рассматриваемая модель: двумерная монокристаллическая полоса.

эффектом, связанным с конечностью рассматриваемого кристалла, является невозможность однозначного определения его толщины H . Так, если положить, что толщина кристалла равна расстоянию между слоями атомов, лежащими на противоположных торцах (см. Рис. 1), то тогда $H = (N - 1)h$. Если, с другой стороны, определить толщину кристалла как произведение числа слоев на толщину одного слоя, то это приводит к формуле $H = Nh$. Поэтому вводится обозначение

$$H \stackrel{\text{def}}{=} N_* h, \quad N - 1 \leq N_* \leq N, \quad (18)$$

где N_* — величина, отражающая произвол в определении H . Рассмотрение равновесия кристалла под действием приложенных нагрузок дает следующие выражения для модулей упругости:

$$\nu_1 = \nu_\infty, \quad \nu_2 = \frac{N-1}{N-\frac{1}{9}} \nu_\infty; \quad E_1 = \frac{N}{N_*} E_\infty, \quad E_2 = \frac{N}{N-\frac{1}{9}} E_\infty.$$

Здесь ν_1 , ν_2 и ν_∞ — значения модуля коэффициента Пуассона, соответствующие растяжению в направлении x , y и бесконечному кристаллу; E_1 , E_2 , E_∞ — соответствующие значения модуля Юнга. Отметим, что рассматриваемый конечный кристалл анизотропен, в то время как соответствующий ему бесконечный кристалл изотропен. При растяжении вдоль атомарных слоев модуль Юнга E_1 существенно зависит от величины N_* , то есть от того, как определяется толщина нанокристаллической полосы. При растяжении перпендикулярно атомарным слоям и коэффициент Пуассона, и модуль Юнга зависят от N , причем при уменьшении числа слоев коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает — см. таблицу 1. При $N \rightarrow \infty$ упругие модули стремятся к значениям, соответствующим бесконечному кристаллу.

| N | E_1^{max}/E_∞ | ν_2 | ν_2/ν_∞ | E_2/E_∞ |
|-----|----------------------|---------|--------------------|----------------|
| 2 | 2.00 | 0.18 | 0.53 | 1.06 |
| 3 | 1.50 | 0.23 | 0.69 | 1.04 |
| 5 | 1.25 | 0.27 | 0.82 | 1.02 |
| 10 | 1.11 | 0.30 | 0.91 | 1.01 |
| 20 | 1.05 | 0.32 | 0.96 | 1.01 |
| 100 | 1.01 | 0.33 | 0.99 | 1.00 |

Таблица 1: Зависимость модулей упругости от числа атомарных слоев, $E_1^{max} = E_1|_{N^*=N-1}$.

В параграфе показано, что в определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности многих макроскопических характеристик, таких как напряжение, модуль Юнга, удельная объемная энергия деформирования. Выбрать универсальное определение для размера нанобъекта не удастся: если добиваться того, чтобы модули упругости были максимально близки к своим макроскопическим значениям, то видоизменяются соотношения Коши-Грина и нарушается симметрия тензора упругости кристалла. Если, напротив, выполнить соотношения Коши-Грина, то значительно усиливается масштабный эффект.

Согласно полученным в параграфе результатам, погрешность, вызванная заменой континуальной среды ее атомарным аналогом, приближенно равна $1/N$, где N — отношение характерного линейного размера модели к среднему межатомному расстоянию. Из данной оценки следует, что для достижения погрешности в 1% при одномерном моделировании требуется 100 частиц, в двумерном случае — 10^4 частиц, в трехмерном — 10^6 . Расчет подобных систем вполне доступен для современных компьютеров, что свидетельствует о принципиальной возможности применения метода частиц в макроскопической области.

Параграф 2.2 посвящен применению для описания частиц модели твердого тела. Экспериментальные данные свидетельствуют, что возбуждение ротационных степеней свободы оказывает принципиальное влияние на механические процессы при деформировании и разрушении. отождествление расчетной частицы с зерном материала требует учета инерции вращения частицы и моментного взаимодействия. Кроме того, учет этих эффектов может быть существенным и на микроуровне, например, при описании свойств ковалентных кристаллов или сложных молекулярных образований. В данном параграфе разрабатывается математический аппарат, предназначенный для описания движения взаимодействующих частиц, представляющих собой твердые тела. Одна из наиболее серьезных проблем состоит в описании инерционных свойств подобных систем, которые могут существенно проявляться при ударных процессах в твердых телах. Инерциальные свойства материальной точки характеризуются одной скалярной величиной — массой, твердого тела — тензором инерции, что серьезно усложняет уравнения

и, как следствие, приводит к значительным вычислительным сложностям при использовании метода частиц.

Обозначим $\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3$ — орты собственного базиса тензора инерции $\underline{\theta}$ твердого тела: $\underline{\theta} = \theta_1 \underline{e}_1 \underline{e}_1 + \theta_2 \underline{e}_2 \underline{e}_2 + \theta_3 \underline{e}_3 \underline{e}_3$, где θ_k — главные моменты инерции. Обозначим ω_k, M_k — проекции угловой скорости $\underline{\omega}$ и внешнего момента \underline{M} на \underline{e}_k . Введем векторные проекции угловой скорости

$$\underline{\omega}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \omega_1 \underline{e}_1, \quad \underline{\omega}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \omega_2 \underline{e}_2, \quad \underline{\omega}_3 \stackrel{\text{def}}{=} \omega_3 \underline{e}_3.$$

Для векторных переменных $\underline{\omega}_k$, описывающих движение твердого тела, имеющего неподвижную точку, в параграфе получена система уравнений

$$\begin{cases} \theta_1 \dot{\underline{\omega}}_1 + (\theta_3 - \theta_2) \underline{\omega}_2 \times \underline{\omega}_3 + \theta_1 \underline{\omega}_1 \times (\underline{\omega}_2 + \underline{\omega}_3) = \underline{M}_1, \\ \theta_2 \dot{\underline{\omega}}_2 + (\theta_1 - \theta_3) \underline{\omega}_3 \times \underline{\omega}_1 + \theta_2 \underline{\omega}_2 \times (\underline{\omega}_3 + \underline{\omega}_1) = \underline{M}_2, \\ \theta_3 \dot{\underline{\omega}}_3 + (\theta_2 - \theta_1) \underline{\omega}_1 \times \underline{\omega}_2 + \theta_3 \underline{\omega}_3 \times (\underline{\omega}_1 + \underline{\omega}_2) = \underline{M}_3, \end{cases} \quad (19)$$

где величины \underline{M}_k являются векторными проекциями действующего на тело внешнего момента: $M_k = M_k \underline{e}_k$. Полученная векторная система уравнений по структуре близка к системе скалярных динамических уравнений Эйлера, однако, ее отличие состоит в том, что решение данной системы дает полное решение задачи о вращении тела, определяя как угловые скорости, так и ориентацию тела в пространстве (векторы $\underline{e}_k = \underline{\omega}_k / \omega_k$ однозначно определяют пространственную ориентацию тензора инерции тела). Векторные уравнения (19) во многом аналогичны скалярным уравнениям Эйлера, и многие методы решения, использующиеся для скалярных уравнений Эйлера, могут быть к ним применены. Отметим, что согласно определению, векторы $\underline{\omega}_k$ ортогональны, а следовательно, удовлетворяют дополнительным скалярным соотношениям $\underline{\omega}_1 \cdot \underline{\omega}_2 = \underline{\omega}_2 \cdot \underline{\omega}_3 = \underline{\omega}_3 \cdot \underline{\omega}_1 = 0$.

Дальнейшее упрощение системы (19) возможно за счет введения динамических векторных переменных $\underline{u}_k = \underline{\theta}^k \cdot \underline{\omega}$ ($k = 0, 1, 2$), однозначно связанных с переменными $\underline{\omega}_k$. Отметим, что $\underline{u}_0 = \underline{\omega}$ представляет собой угловую скорость, а $\underline{u}_1 = \underline{L}$ — кинетический момент твердого тела. Обозначим $I_1 = \theta_1 + \theta_2 + \theta_3$, $I_3 = \theta_1 \theta_2 \theta_3$, тогда для переменных \underline{u}_k справедлива система уравнений

$$\dot{\underline{u}}_0 + \frac{1}{I_3} \underline{u}_1 \times \underline{u}_2 = \underline{\theta}^{-1} \cdot \underline{M}, \quad \dot{\underline{u}}_1 = \underline{M}, \quad \dot{\underline{u}}_2 + I_1 \underline{u}_0 \times \underline{u}_1 + 2 \underline{u}_2 \times \underline{u}_0 = \underline{\theta} \cdot \underline{M}, \quad (20)$$

близкая по структуре к (19), однако имеющая более простую и удобную для численной реализации форму. Правые части уравнений могут быть представлены в виде разложения по векторам \underline{u}_k . Система (20), как и (19), избыточна. Этот недостаток может быть устранен путем представления вектора \underline{u}_3 через \underline{u}_1 и \underline{u}_2 , что позволяет записать уравнения движения

относительно двух векторных переменных — вектора угловой скорости $\underline{\omega}$ и кинетического момента \underline{L}

$$\dot{\underline{\omega}} - \frac{1}{I_3} \frac{hH_3 - L^4}{\omega^2 L^2 - h^2} \underline{L} \times \underline{\omega} \pm \frac{1}{I_3} \frac{\sqrt{\Delta(\mathcal{H})}}{\omega^2 L^2 - h^2} \underline{L} \times (\underline{L} \times \underline{\omega}) = \underline{\theta}^{-1} \cdot \underline{M}, \quad \dot{\underline{L}} = \underline{M}, \quad (21)$$

где скаляры h , H_3 и $\Delta(\mathcal{H})$ в (21) являются известными функциями векторов \underline{L} и $\underline{\omega}$. Выбор одной из предложенных систем уравнений для численного решения уравнений движений частиц осуществляется в зависимости от специфики конкретной задачи моделирования.

Третья глава посвящена компьютерному моделированию с использованием идеальных кристаллических упаковок частиц. **В первом параграфе** главы описывается техника моделирования. Моделируемый объект представляется совокупностью N взаимодействующих материальных точек (частиц), описываемых в общем случае следующими уравнениями движения

$$m \ddot{\underline{r}}_k = \sum_{n=1}^N \Phi(r_{kn}) \underline{r}_{kn} + \sum_{n=1}^N \Psi(r_{kn}, v_{kn}) \underline{r}_{kn} + \underline{\varphi}(\underline{r}_k) + \underline{\psi}(\underline{r}_k, \underline{v}_k), \quad (22)$$

где \underline{r}_k и \underline{v}_k — векторы положения и скорости k -ой частицы,

$$\underline{r}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{r}_k - \underline{r}_n, \quad \underline{v}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{v}_k - \underline{v}_n, \quad r_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} |\underline{r}_{kn}|, \quad v_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} |\underline{v}_{kn}|, \quad (23)$$

m — масса частицы, $\Phi(r)$ и $\Psi(r, v)$ задают консервативную и неконсервативную составляющую взаимодействия между частицами, $\underline{\varphi}(\underline{r})$ и $\underline{\psi}(\underline{r}, \underline{v})$ задают внешнее консервативное и неконсервативное силовое поле. Наиболее важна консервативная составляющая взаимодействия $\Phi(r)$, определяемая как

$$\Phi(r) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{r} f(r), \quad f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r), \quad (24)$$

где $f(r)$ — скалярная сила взаимодействия между частицами, $\Pi(r)$ — потенциал взаимодействия. Неконсервативная составляющая взаимодействия $\Psi(r, v)$ предназначена для описания внутренней диссипации в материале, во многих задачах может отсутствовать. Внешние силовые поля $\underline{\varphi}(\underline{r})$ и $\underline{\psi}(\underline{v})$ обычно используются для двух целей: для задания внешних массовых силовых воздействий (гравитационного, электромагнитного) и для задания силовых граничных условий. В первом случае указанные силы распределены во всем объеме пространства, где проводится расчет, во втором случае они локализованы вблизи некоторых поверхностей, часто являющихся границами области расчета. Кроме того, неконсервативное воздействие $\underline{\psi}(\underline{r}, \underline{v})$ часто используется для отвода энергии из системы посредством внешней диссипации, простейшим вариантом которой являются силы вязкого трения

$$\underline{\psi}(\underline{r}, \underline{v}) = -B \underline{v}, \quad B > 0. \quad (25)$$

Данное воздействие может также использоваться для поддержания требуемого уровня теплового движения, в этом случае коэффициент B в формуле (25) является знакопеременным и зависит от уровня тепловой энергии системы.

С математической точки зрения моделирование состоит в численном решении задачи Коши для дифференциальных уравнений (22). В параграфе обсуждается выбор метода численного интегрирования уравнений движения, рассматриваются методы Верле, Виньярда, Нордзика и др. Начальные условия для уравнений (22) представляют собой распределение частиц и их скоростей в пространстве. Генерация начальных условий является отдельной задачей, так как структура исходной упаковки частиц существенным образом влияет на свойства модели. Начальные условия по скоростям обычно содержат макроскопическую скорость, задаваемую в виде медленно изменяющейся функции координаты частицы, и скорость теплового (хаотического) движения, задаваемую для каждой частицы в виде случайной величины, имеющей определенное среднеквадратичное отклонение от макроскопической скорости. Квадрат данного отклонения может характеризовать или температуру вещества или дисперсию скоростей мезочастиц, в зависимости от масштаба моделирования.

В параграфе рассмотрен ряд наиболее часто встречающихся в литературе потенциалов взаимодействия. Обозначим a и b расстояния, на которых обращается в ноль, соответственно, первая и вторая производные потенциала взаимодействия. Отметим, что a — равновесное расстояние между двумя частицами, b — расстояние разрыва связи. Для сравнения потенциалов взаимодействия используются следующие безразмерные параметры

$$\varepsilon_* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{b}{a} - 1, \quad k_* \stackrel{\text{def}}{=} (b - a) \frac{\Pi''(a)}{\Pi'(b)}, \quad k_v \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{-\frac{a^2 \Pi''(a)}{2\Pi(a)}}, \quad \Gamma \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{a\Pi'''(a)}{2\Pi''(a)}.$$

Здесь ε_* — относительное удлинение межатомной связи при ее разрыве, k_* — мера нелинейности взаимодействия (отношение в точке разрыва значений линеаризованной и нелинейной сил взаимодействия), k_v — отношение скорости распространения длинных волн в одномерной цепочке частиц к скорости диссоциации, Γ — коэффициент Грюнайзена бесконечной одномерной цепочки в окрестности положения равновесия. В параграфе рассмотрены потенциалы Ми, Леннарда-Джонса, Морзе, модифицированные, сплайновые и др., дан краткий анализ их свойств, достоинств и недостатков для применения в моделировании деформирования и разрушения.

На основании результатов предыдущих глав, в параграфе получены конкретные выражения для ряда важнейших макроскопических характеристик кристаллических упаковок через микроструктурные параметры моделирования. Рассмотрены одномерные, двумерные и трехмерные упаковки. Рассчитаны равновесные состояния ряда упаковок частиц при взаимодействии

атомов нескольких координационных сфер. Далее рассматривается методика определения параметров моделирования по макроскопическим параметрам моделируемого объекта. Для определения размерных параметров модели выбираются три базовых размерных величины — масса частицы m , равновесное расстояние a в системе из двух частиц, период T_0 малых одномерных колебаний частицы в потенциальном поле, определяемом выбранным потенциалом взаимодействия. Все остальные размерные параметры могут быть выражены через них и безразмерные коэффициенты. Для базовых параметров массы, расстояния и времени получены следующие формулы

$$m = \frac{M}{N}, \quad a = \frac{1}{\chi} \sqrt[d]{\frac{V}{p\mathcal{V}_0 N}}, \quad T_0 = 2\pi \frac{\lambda a}{v_l}, \quad (26)$$

где M , V , v_l — размерные макроскопические параметры (масса и объем моделируемого объекта, скорость распространения длинных продольных волн в материале); d , N , p — безразмерные параметры, определяемые условиями моделирования (размерность пространства, число частиц, пористость упаковки); χ , \mathcal{V}_0 , λ — безразмерные коэффициенты, значения которых рассчитываются для основных упаковок частиц. Использование формул (26) гарантирует при достаточно большом количестве частиц точное соответствие компьютерной модели следующим макроскопическим свойствам моделируемого объекта: масса, плотность, геометрические размеры, скорость распространения линейных упругих продольных волн в выбранном направлении. Кроме того, приближенное соответствие достигается для упругих модулей материала и скорости распространения различных волн в рамках линейной теории. Более точное соответствие может быть достигнуто при использовании поликристаллических и аморфных упаковок частиц. Формулы (26) предназначены для динамических компьютерных экспериментов, для квазистатических экспериментов предлагаются альтернативные формулы.

Дальнейшее уточнение модели, прежде всего применительно к нелинейному деформированию и разрушению, может быть осуществлено выбором безразмерных параметров (26) потенциала взаимодействия в соответствии с требуемыми значениями безразмерных макроскопических параметров моделируемого материала, такими, как относительное удлинение при разрыве, отношение модуля Юнга к пределу прочности, отношение скорости распространения упругих волн к откольной скорости, параметр Грюнайзена и др. Указанный выбор в простейших случаях может осуществляться аналитически, в более сложных он требует проведения тестовых компьютерных экспериментов, по возможности повторяющих известные натурные эксперименты.

В параграфе 3.2 на конкретных задачах, имеющих самостоятельное

значение, демонстрируются технология использования и некоторые достоинства метода частиц при моделировании неупругого деформирования. Рассматриваются задачи, в которых при моделировании наблюдаются такие процессы, как пластическое течение материала, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы. Так, на Рис. 2 изображе-

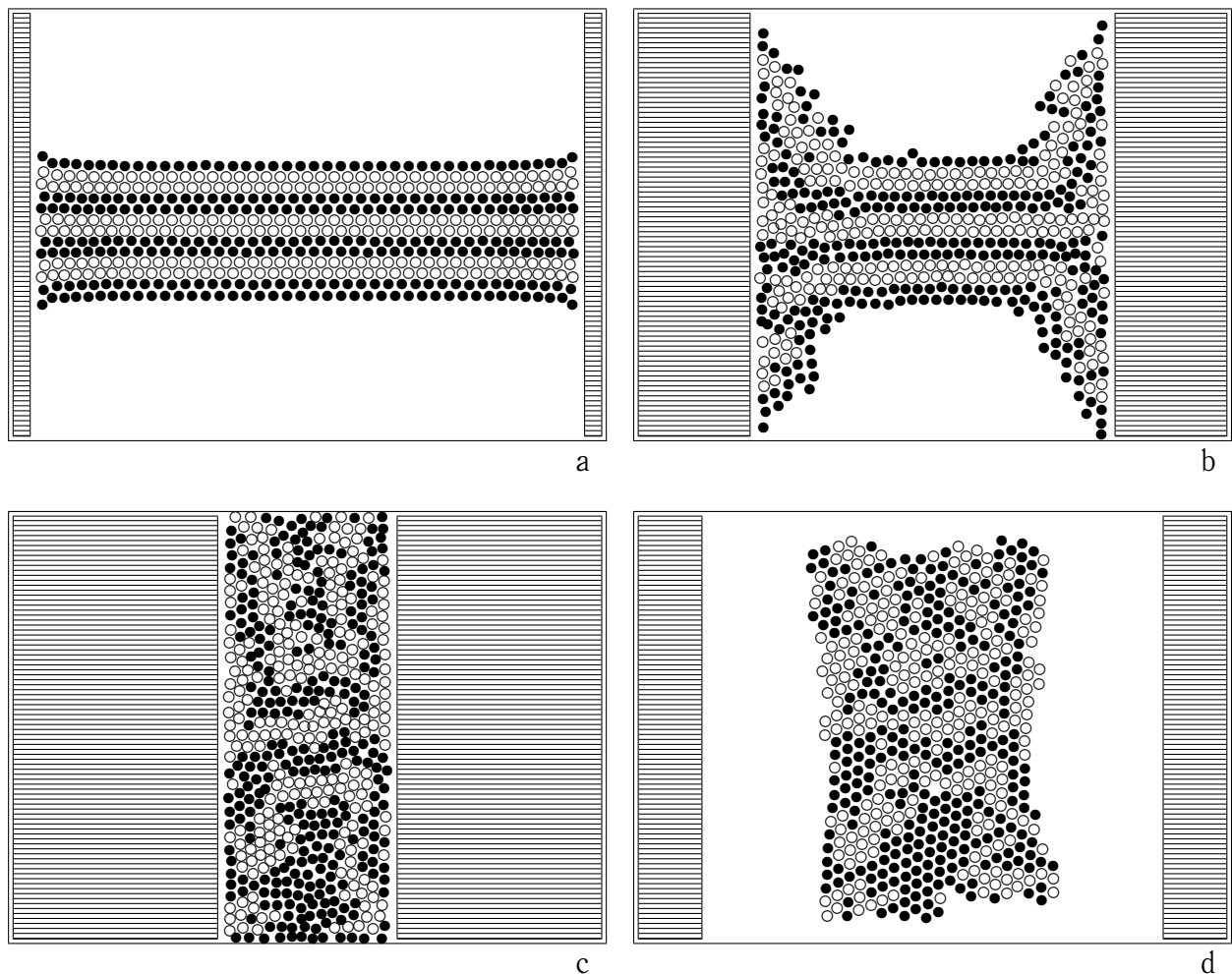


Рис. 2: Быстрое сжатие призматического образца

ны результаты компьютерного эксперимента по ударному сжатию призматического образца, состоящего из 540 частиц, взаимодействующих по закону Леннарда-Джонса. Для наглядности на Рис. 2 рассматривается небольшое количество частиц, позволяющее визуально проследить механизм работы метода. Сжатие осуществляется посредством двух абсолютно жестких стенок. Рис. 2а показывает начало эксперимента, образец находится в недеформированном состоянии и обладает регулярной кристаллической структурой. Различные горизонтальные слои материала выделены черным и белым цветом так, чтобы было возможно при деформировании наблюдать пластическое течение материала. Рис. 2b демонстрирует образец в процессе сжатия, кристаллическая структура в деформированной области образца

разрушена и материал в этой зоне находится практически в жидкой фазе. Рис. 2с соответствует моменту максимального сжатия, а Рис. 2д демонстрирует образец после снятия нагрузки. Из рисунков видно, что частицы, бывшие соседними в исходной конфигурации, после сильного деформирования могут оказаться в различных областях образца, слои материала в процессе деформирования приобретают сложную, часто разрывную структуру. Моделирование подобных процессов методами механики сплошной среды оказывается затруднительным в виду противоречия между непрерывностью описания среды и очевидным нарушением непрерывности в материале в процессе деформирования.

В параграфе 3.3 исследуется процесс ударного взаимодействия твердых тел и откольного разрушения. Особое внимание уделяется возбуждению хаотической составляющей скоростей частиц в результате прохождения ударной волны. Актуальность этого вопроса связана с тем, что, согласно экспериментальным данным, дисперсия скоростей мезочастиц характеризует интенсивность релаксационных процессов во время прохождения ударной волны, а следовательно, повышает прочность материала. Однако из экспериментов удастся определить распределение скоростей только на внешних поверхностях образца, в то время как моделирование методом частиц позволяет наблюдать распределение скоростей частиц как на поверхности, так и внутри образца. Так как целью данного исследования является качественное рассмотрение процессов, возникающих в материале при прохождении ударной волны, то используется двумерная совокупность частиц, взаимодействующих посредством потенциала Леннарда-Джонса. Компьютерная модель эксперимента, насчитывающая 20 000 частиц, представлена на Рис. 3. Изначально частицы упорядочены в треугольную решетку, заполняющую два прямоугольника, моделирующие сечения ударника и мишени. 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. Используются обозначения

$$\bar{V}_z = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n V_{kz}, \quad \sigma_z = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (V_{kz} - \bar{V}_z)^2, \quad \Delta V_z = \sqrt{\sigma_z}, \quad (27)$$

где $k = 1, 2, \dots, n$ — номер частицы, V_{kz} — проекции скоростей частиц, σ_z и ΔV_z — дисперсия и девиация скоростей частиц в направлении z . Аналогичным образом определяются σ_x и ΔV_x .

Полученные в ходе моделирования графики распределения деформации и девиаций скоростей частиц вдоль продольной координаты z приведены

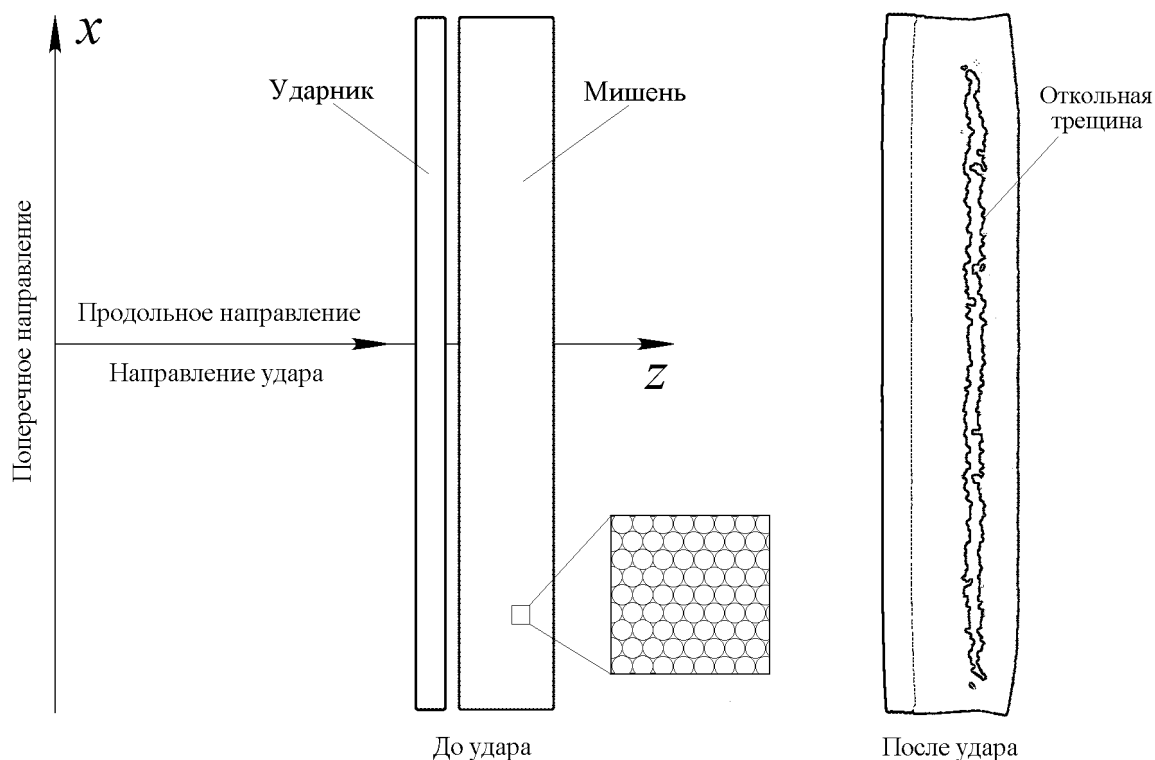


Рис. 3: Компьютерная модель ударного нагружения.

на Рис. 4–5. Для наглядности масштабы времени, расстояния и скорости при компьютерном моделировании были приведены в соответствие с соответствующими масштабами в экспериментах с вязкими высокопрочными сталями. В ходе исследования получены следующие выводы: дисперсия продольных скоростей мезочастиц ($\sigma_z = \Delta V_z^2$) возбуждается фронтом ударной волны и следует за ним с некоторой задержкой (см. Рис. 4); дисперсия поперечных скоростей мезочастиц ($\sigma_x = \Delta V_x^2$) близка к σ_z но возбуждается с большей задержкой (см. Рис. 4); в зоне откольного разрушения дисперсия имеет локализованный максимум (Рис. 5); несмотря на удвоение скорости частиц на свободной поверхности, дисперсия на свободной поверхности не возрастает.

В параграфе 3.4 исследуются влияние хаотической составляющей движения частиц на откольную прочность. Из экспериментов известно, что дисперсия скоростей мезочастиц оказывает существенное влияние на макроскопическую динамическую прочность материала. В данном параграфе проводится компьютерное исследование этого явления. Используется та же расчетная модель, что и в предыдущем параграфе. Результаты компьютерных экспериментов представлены на Рис. 6, где показаны зависимости ширины трещины h и откольной скорости W от начальной девиации. Из графика видно, что увеличение дисперсии скоростей частиц от нуля до зна-

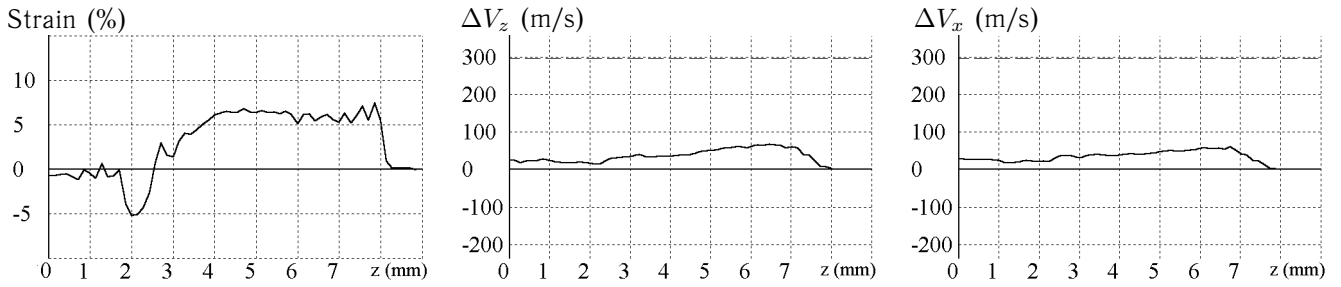


Рис. 4: Дисперсия возбуждается волновым фронтом ($t = 0.5$ мкс).

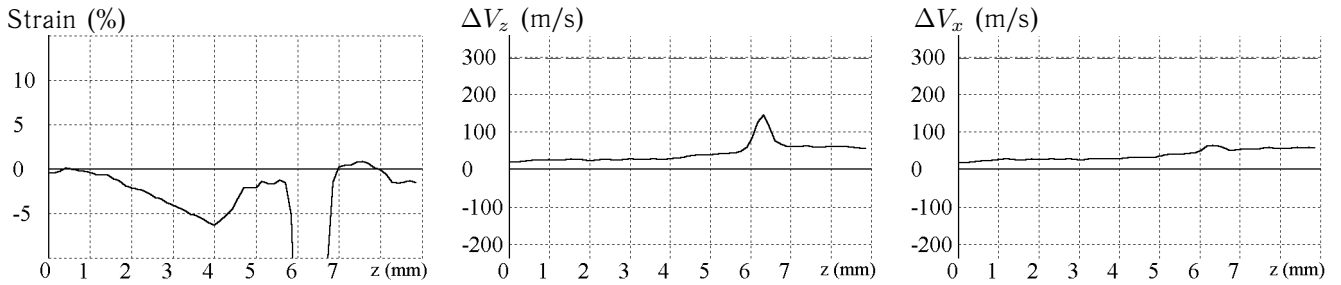


Рис. 5: Локализованный максимум дисперсии в откольной зоне ($t = 1.3$ мкс).

чения, соответствующего девиации 15–25 м/с, приводит к существенному увеличению прочности 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 — ширина области разрушения значительно меньше при высокой дисперсии. 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.

В параграфе 3.5 рассмотрены некоторые специфические эффекты трехмерного моделирования методом частиц, которые не могут наблюдаться на двумерных экспериментах. Для сравнения результатов двух- и трехмерного моделирования используются эксперименты по плоскому откольному разрушению. Трехмерная компьютерная модель представлена на Рис. 7а. Частицы формируют две квадратные пластины, представляющие ударник (верхняя пластина) и мишень (нижняя пластина). Частицы упорядочены в гранецентрированную кубическую решетку. Приблизительное число частиц — 1200. Относительно небольшое число частиц использовано на Рис. 7 для демонстрации эффекта дискретизации. После контакта ударник и мишень объединяются, однако в результате откола от мишени отделяется откольная пластина, имеющей толщину, приблизительно равную толщине ударника. Краевой эффект, который особенно силен в углах пластин,

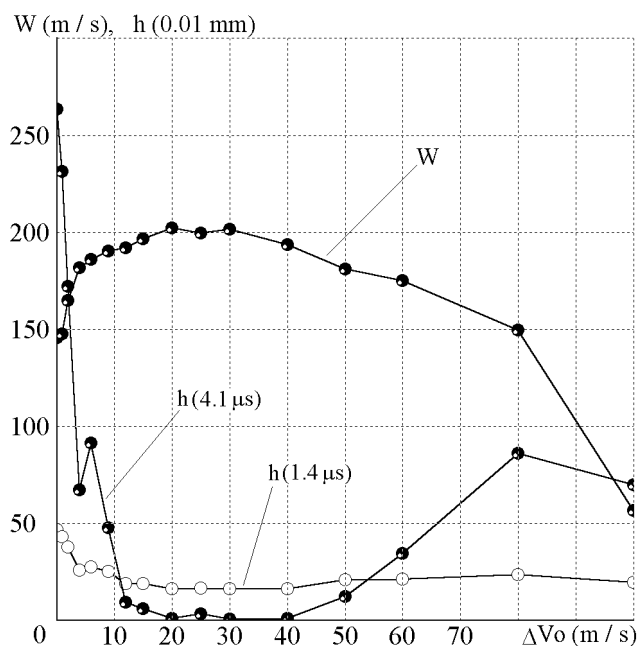


Рис. 6: Зависимость откольной скорости W и толщины откольной трещины h от начальной девиации скоростей частиц.

приводит к сильной пластической деформации материала в этой области. На Рис. 7с хорошо виден эффект, реализующийся только при трехмерном моделировании — образование в результате фокусировки ударных волн отверстия в центре откольной пластины.

Откол в полномасштабной модели, содержащей 150 000 частиц показан на Рис. 8. Ударник и мишень представлены круговыми пластинами. Выбранная скорость ударника недостаточна для разрушения центральной области откольной пластины, однако хорошо видны распространяющиеся концентрические волны. Толщина ударника незначительна по сравнению с его диаметром. В результате откольная пластина, имеющая те же пропорции, что и ударник, имеет малую изгибную жесткость, что позволяет ей существенно деформироваться под действием краевых сил, возникших при ее отрыве от мишени. Подобные эффекты наблюдаются в натуральных экспериментах при отколе фольг.

Четвертая глава посвящена компьютерному моделированию с использованием пористых поликристаллических упаковок частиц. Одна из основных проблем в применении метода частиц для моделирования макроскопического поведения твердых тел состоит в том, что любые регулярные упаковки частиц анизотропны. По этой причине метод частиц, широко применяющийся для моделирования кристаллических материалов, на настоящее время достаточно редко используется в моделировании изотропных твердых тел. Подход, позволяющий решить эту проблему, состоит в конструировании поликристаллических упаковок частиц со случайным распре-

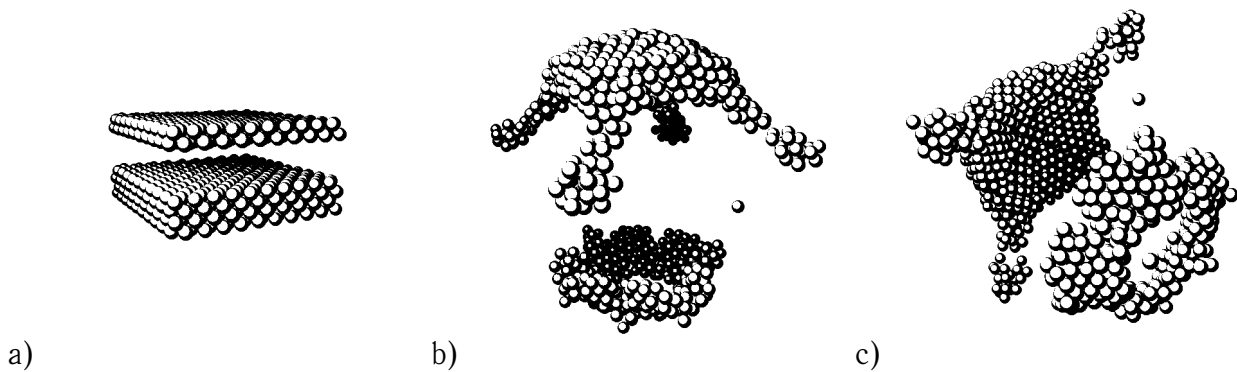


Рис. 7: Трехмерный компьютерный эксперимент по откольному разрушению: а) до удара, б) после откола, с) другая проекция.

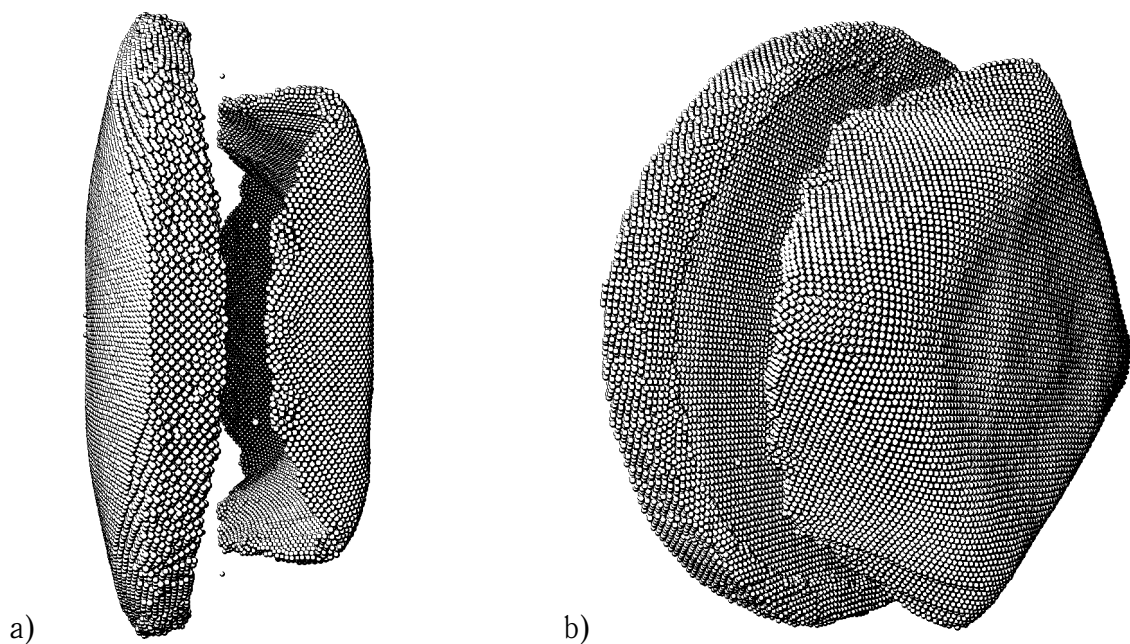


Рис. 8: Модель после откола, показанная с разных точек в пространстве (150 000 частиц).

делением ориентации монокристаллов. Подобная технология требует значительно больших компьютерных ресурсов, так как в этом случае в качестве элементарного объема выступает монокристаллическое зерно, содержащее по крайней мере сотни частиц. Поэтому полномасштабное использование поликристаллических компьютерных материалов началось только недавно, следуя за увеличением мощности современных компьютеров.

Первый параграф главы посвящен разработке методов построения пористых поликристаллических компьютерных материалов. В начале параграфа дается краткий обзор существующих методов. Далее предлагается два новых метода, позволяющих в ходе одного цикла моделирования создать серию образцов с различными значениями пористости материала.

Первый метод состоит в создании поликристаллического материала из

монокристаллических зерен в ходе их квазистатической прессовки. На первом этапе в ходе конденсирования газообразной смеси частиц происходит формирование монокристаллических зерен. Выбор параметров конденсации позволяет получить различные геометрические характеристики зерен. На следующем шаге совокупность зерен сжимается равномерно во всех направлениях, в результате чего зерна объединяются и формируют пористый материал. Примеры поликристаллических компьютерных материалов различной пористости, полученных в результате прессования зерен, показаны на Рис. 9, где белый цвет используется для обозначения материала, черный

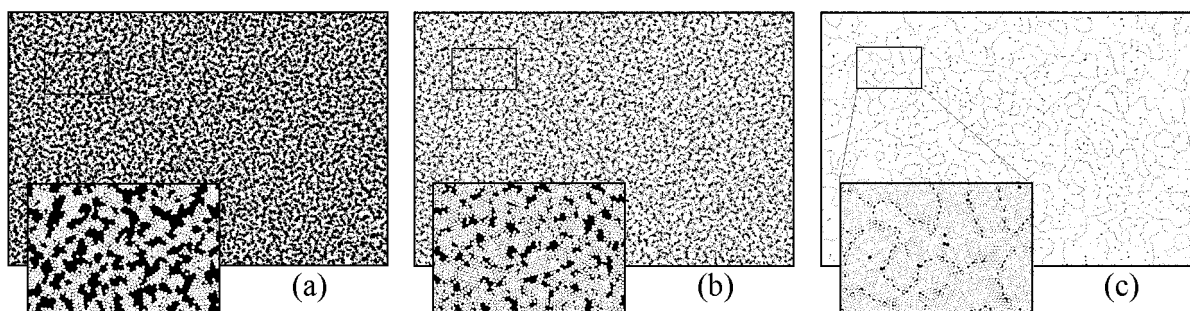


Рис. 9: Образцы материала различной пористости (каждый образец содержит около 100 000 частиц). Пористость: а) 20%, б) 10%, в) 1%.

для пустот. Каждый двумерный образец содержит приблизительно 100 тысяч частиц. Для каждого из образцов приведено увеличение небольшого участка его внутренней области для визуализации внутренней структуры материала. Достоинством данного метода создания поликристаллического материала является то, что в результате прессовки достигается большее сцепление между зернами, чем при других методах, что позволяет получить более качественные механические характеристики образцов. Кроме того, путем варьирования параметров процесса конденсации возможно получение зерен разнообразных форм и размеров. Недостатком метода являются большие затраты времени, необходимые для достаточно медленного (квазистатического) прессования.

Второй метод использует алгоритм последовательного заполнения и позволяет ускорить процесс создания поликристаллического материала. Для ускорения расчета при создании поликристалла применяется потенциал Ми 4–6, так как он обеспечивает большую плотность упаковки и скорость агломерации. Затем, когда необходимая пористость достигнута, потенциал Ми может быть заменен на потенциал Леннарда-Джонса или любой другой, который больше подходит для дальнейшего исследования. После того, как образцы с различной пористостью получены и сохранены, к ним применяется дополнительная обработка, которая может включать плавление образца с последующим охлаждением. Плавление означает, что к скорости каждой частицы добавляется случайная скорость, такая, чтобы кинетическая

энергия частиц значительно превысила энергию связи. Плавление позволяет получить более однородную поликристаллическую структуру материала. Кроме того, изменяя скорость охлаждения, удастся получить материал с различным размером зерен.

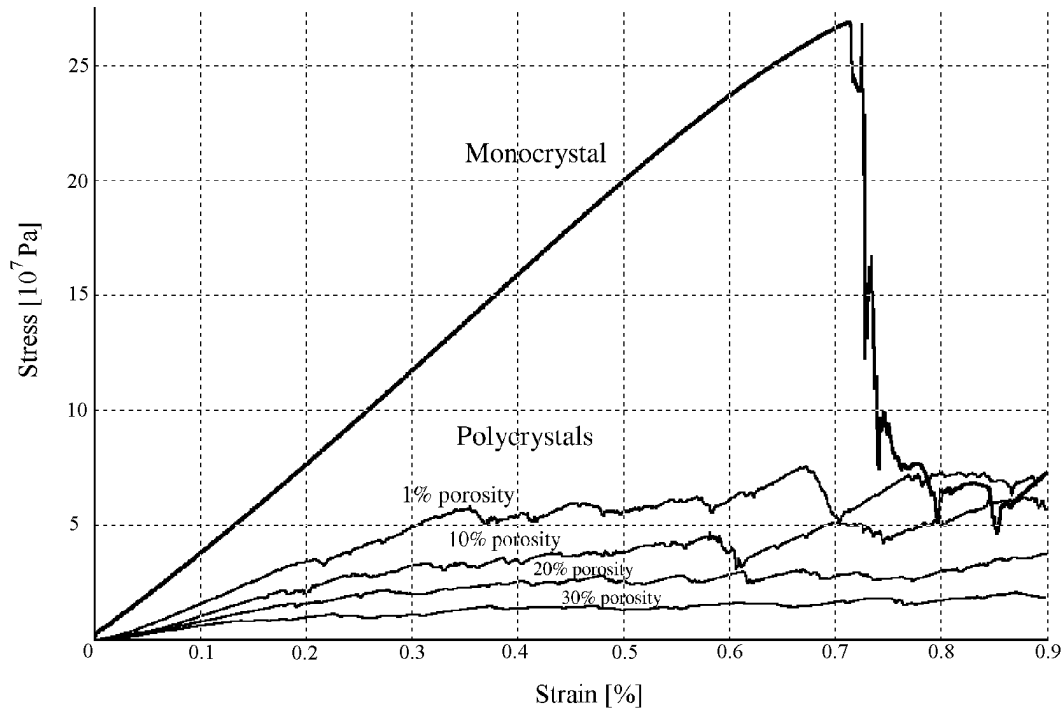


Рис. 10: Сравнение диаграмм нагружения моно- и поликристаллических материалов.

После того, как материал с требуемой пористостью сгенерирован, он может использоваться в различных тестовых задачах для определения его механических свойств. В данном параграфе рассмотрены квазистатические тесты по одноосному сжатию прямоугольных образцов. Параметры потенциала взаимодействия между частицами таковы, что механические свойства образцов близки к свойствам песчаника. Диаграммы нагружения для моно- и поликристаллических образцов сравниваются на Рис. 10. Из рисунков видно, что прочность монокристаллического материала значительно выше, чем поликристаллического. Более того, монокристаллический материал демонстрирует хрупкое поведение, в то время как поликристаллический в большей степени проявляет пластические свойства.

Параграф 4.2 посвящен динамическим компьютерным экспериментам с поликристаллическими материалами. Для сравнения свойств моно- и поликристаллических компьютерных материалов выбраны эксперименты по плоскому откольному разрушению. Монокристаллический образец содержащий 30 000 частиц после откола показан на Рис. 11. Вблизи боковых поверхностей образца наблюдается специфическая локализация разрушения, вызванная отражением волн от свободных поверхностей образца. Результа-

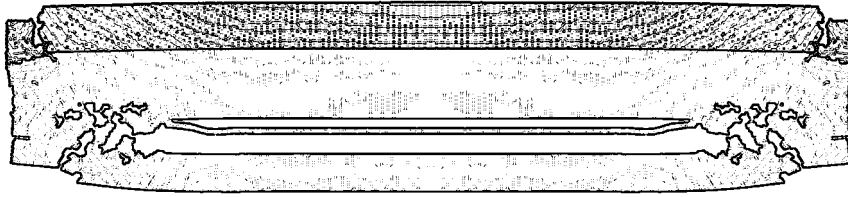


Рис. 11: Откол в монокристаллическом образце.

ты аналогичного компьютерного эксперимента, в котором использовалась мишень из поликристаллического материала, приведены на Рис.12. Анализ характера разрушения образцов показывает, что для поликристаллов характерно сглаживание фронта ударной волны, связанное с неоднородностью их внутренней структуры, что приводит к уменьшению локализационных эффектов, характерных для монокристаллов. Аналогичный экспе-

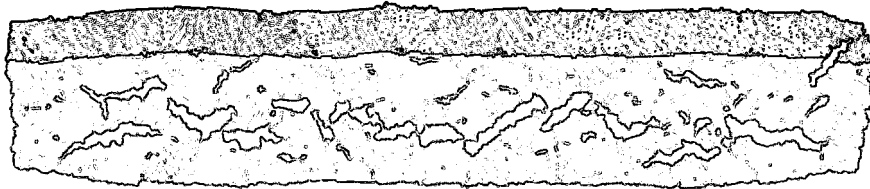


Рис. 12: Откол в поликристаллическом образце. Исходная пористость мишени 1%.

римент с мишенью, сформированной из материала со значительно более высоким уровнем пористости (15%) показан на Рис.13. Несмотря на то, что высокопористый материал, вообще говоря, значительно менее прочен, трещины в зоне откольного разрушения заметно мельче. Еще более ярко выражен этот эффект на Рис.14, где аналогичный эксперимент проведен

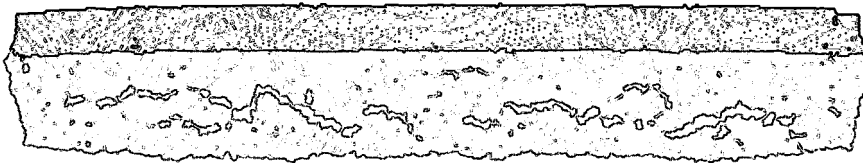


Рис. 13: Откол в поликристаллическом образце. Исходная пористость мишени 15%.

с мишенью, имеющей 30% пористость. Откол на Рис.14 фактически отсутствует. Объяснение этого явления может быть получено из сравнения внутренней структуры материала до и после удара — пористый материал оказывается прочнее по отношению к откольному разрушению, так как он может абсорбировать энергию за счет сильных пластических деформаций в его микроструктуре.



Рис. 14: Результат плоского удара по поликристаллическому образцу. Исходная пористость мишени 30%.

Параграф 4.2 посвящен моделированию пластических эффектов при распространении ударных волн. В реальных экспериментах наблюдается разделение ударной волны на упругий предвестник и пластический фронт, которое слабо выражено или отсутствует при моделировании методом частиц при использовании монокристаллических упаковок. Для описания подобных эффектов в данном параграфе используется компьютерная модель пористого кристаллического материала. На Рис. 15а приведена зависимость скорости свободной поверхности мишени от времени, полученная в результате компьютерного моделирования в монокристаллическом образце, содержащем 100 000 частиц. Для сравнения на Рис. 15б приведена

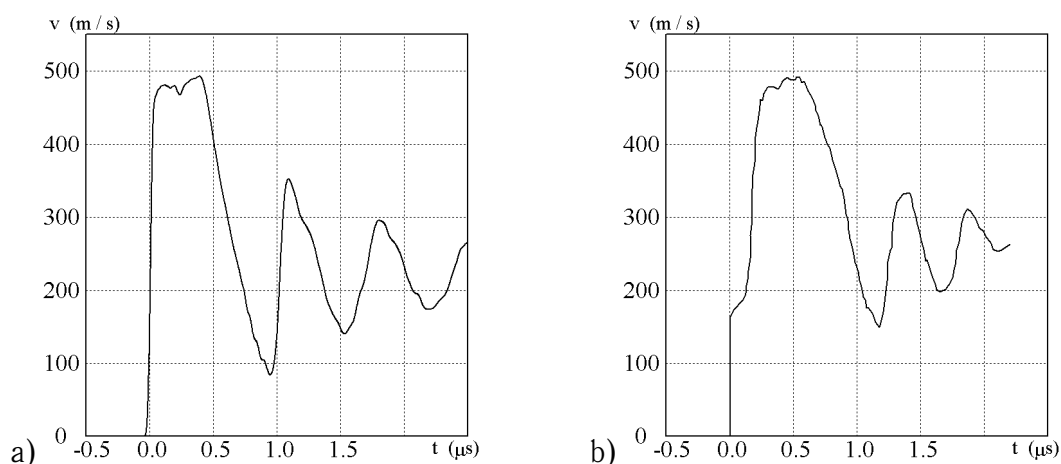


Рис. 15: Зависимость скорости свободной поверхности мишени от времени: а) монокристалл (расчет), б) титановый сплав (эксперимент).

аналогичная зависимость, полученная из натурального эксперимента по откольному разрушению в титановом сплаве при скорости ударника 602 м/с (Mescheryakov Y. I., Divakov A. K., Zhigacheva N. I. // Shock Waves. 2000. № 10. P. 43–56). Форма графиков во многом совпадает, однако на численном эксперименте не наблюдается разделения фронта ударной волны на упругий предвестник и пластический фронт. Рассмотрим аналогичный компьютерный эксперимент с пористым кристаллическим образцом, содержащим 500 000 частиц. На Рис. 16 приведены полученные зависимости скорости свободной поверхности от времени при выходе ударной волны на

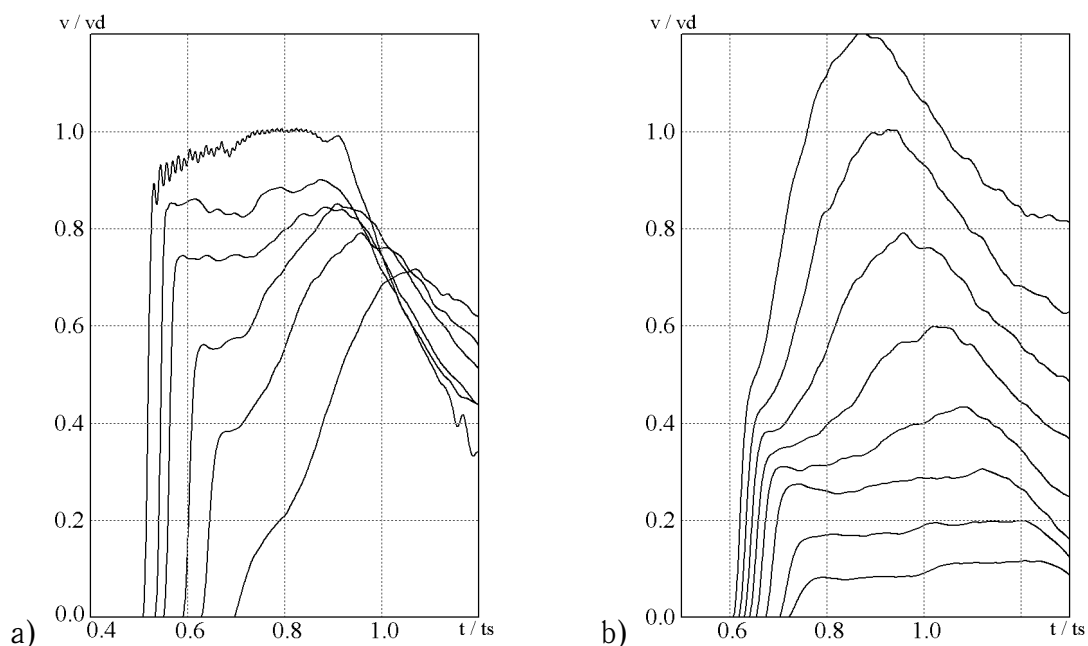


Рис. 16: Профили скорости свободной поверхности мишени, моделирование, 500 000 частиц: а) при $v_{\text{imp}} = v_d$ и пористости 0%, 1%, 2%, 4%, 6%, 9%; б) при пористости 6% и $v_{\text{imp}}/v_d = 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4$.

поверхность мишени при разных значениях пористости и скорости ударника v_{imp} . Масштаб времени и скорости выбран в единицах расчетного времени откола t_s и расчетной минимальной скорости ударника v_d , вызывающей откол в монокристаллическом материале. С увеличением пористости амплитуда упругого предвестника убывает значительно быстрее, чем амплитуда пластического фронта, что приводит к их четкому разделению — Рис. 16 а. Таким образом удается получить временные зависимости скорости свободной поверхности, очень близкие к реализующимся в натуральных экспериментах, в частности по откольному разрушению титановых сплавов.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

1. Разработан метод прямого получения континуальных уравнений среды из уравнений движения частиц при нелинейных упругих деформациях. На основе данного метода решена задача о нелинейном упругом деформировании бесконечной монокристаллической упаковки частиц, получены определяющие уравнения общего вида, которые конкретизируются для частных случаев геометрически нелинейного материала и материала Сетха. Получены определяющие уравнения для поликристаллической упаковки частиц при нелинейном упругом деформировании в виде ряда по степеням главных инвариантов тензора деформаций. Полученные результаты могут эффективно использоваться для анализа результатов численного моделирования с использованием моно- и поликристаллических упаковок частиц.

2. Развита методика, позволяющая учитывать хаотическое движение частиц при моделировании в критических случаях, например, вблизи точки разрушения. Для бесконечного одномерного кристалла получены уравнения состояния, аналогичные уравнению Ми-Грюнаузена, но, в отличие от последних, позволяющие описать термодинамическое состояние при сильном растяжении кристалла вплоть до точки разрыва.
3. Решена задача об упругом деформировании конечного кристалла, получены зависимости его упругих модулей от размеров кристалла. Полученные результаты позволяют оценить погрешность дискретизации при использовании метода частиц, а также позволяют описывать аномалии механических характеристик наноразмерных объектов. Показано, что форма и размеры нанокристалла вносят анизотропию в его упругие свойства — на анизотропию, связанную с видом кристаллической решетки, накладывается дополнительная анизотропия, вызванная его размерами и формой. Получено, что в определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности многих макроскопических характеристик.
4. Предложена специальная форма уравнений движения твердого тела, удобная для описания движения больших систем взаимодействующих твердых тел. В частности, получен векторный аналог динамических уравнений Эйлера, решение которых позволяет определить не только проекции угловой скорости на оси подвижного базиса, но и ориентацию тела в пространстве; уравнения движения твердого тела сведены к нелинейной системе векторных уравнений относительно двух векторных неизвестных: вектора кинетического момента и угловой скорости.
5. На основании аналитического решения перечисленных выше задач нелинейной термоупругости для различных упаковок частиц разработана методика численного моделирования методом частиц макроскопических процессов в твердых телах с микроструктурой. С помощью данной методики решен ряд задач о сильном деформировании и разрушении твердых тел.
6. Компьютерным моделированием методом частиц исследована задача об откольном разрушении при плоском ударном взаимодействии двух пластин. Показано, что дисперсия скоростей частиц возбуждается фронтом ударной волны и следует за ним с некоторой задержкой, а в зоне откольного разрушения дисперсия имеет локализованный максимум. Доказано, что при выходе ударной волны на свободную поверхность твердого тела не происходит возрастания дисперсии, аналогичного возрастанию массовой скорости частиц.
7. Моделирование откольного разрушения позволило дать объяснение экспериментальному факту взаимосвязи откольной прочности и дисперсии

скоростей частиц. Показано, что при малой дисперсии происходит локализация зоны разрушения и, как следствие, охрупчивание материала. Большие значения дисперсии приводит к размыванию фронта ударной волны и к интенсификации релаксационных процессов, что в конечном итоге приводит к повышению прочности материала.

8. Разработана методика создания поликристаллических компьютерных материалов с различными механическими свойствами. Предложенные методы основаны на последовательном приготовлении из единого начального набора частиц серии образцов с различными параметрами микроструктуры.
9. Решена квазистатическая задача об одноосном сжатии призматических образцов из моно- и поликристаллического материала. Показано, что неупругое деформирование осуществляется в результате многократных перестроек внутренней структуры образца. Получены зависимости упругих и прочностных характеристик от пористости материала.
10. Численно исследовано распространение ударной волны и откольное разрушение в пористом кристаллическом материале. Показано, что пористый материал может иметь повышенную устойчивость к откольному разрушению за счет поглощения энергии волны в результате преобразования внутренней структуры материала. Показано разделение фронта ударной волны на упругий предвестник и пластический фронт. Исследована зависимость данного эффекта от величины пористости и скорости ударника.

Основные результаты опубликованы в следующих работах:

1. Кривцов А. М. К теории сред с микроструктурой // Труды СПбГТУ. 1992. № 443. С. 9–17.
2. Кривцов А. М. Растяжение системы из четырех взаимодействующих атомов // Труды СПбГТУ. 1994. № 448. С. 176–178.
3. Кривцов А. М. Изотропная часть нелинейных определяющих уравнений идеальной кристаллической решетки // Тр. СПбГТУ. 1995. № 458. С. 132–140.
4. Кривцов А. М. Одномерные квадратичные отображения // Труды СПбГТУ. 1995. № 458. С. 141–151.
5. Кривцов А. М. Квазикоординаты в описании движения осесимметричного твердого тела в линейно вязкой среде // Труды СПбГТУ. 1997. № 467. С. 91–99.
6. Кривцов А. М. Стационарные движения несимметричного волчка // Изв. РАН. МТТ. 1997. № 3. С. 28–38.
7. Krivtsov A. M. Stability and Bifurcation of Stationary Motions of Elastically Mounted Rigid Body // ZAMM · Z. angew. Math. Mech. 1997. V. 77.

№ S1. P. 171–172.

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). Lyon, France. 1997. P. 121–128.
9. Кривцов А. М. Компьютерное исследование взаимосвязи между откольной прочностью и дисперсией скоростей мезочастиц // Труды XXV–XXVI летних школ Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем. С.-Пб. 1998. Т. 2. С. 246–257.
10. Кривцов А. М., Мещеряков Ю. И. Компьютерное исследование возбуждения дисперсии скоростей мезочастиц в результате прохождения ударной волны // Труды XXV–XXVI летних школ Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем. С.-Пб. 1998. Т. 2. С. 258–267.
11. Krivtsov A. M. Molecular Dynamics Investigation of the Spall Fracture // Preprints of the Second International Workshop HI-TECH 98: Nondestructive Testing and Computer Simulations in Sciences and Engineering. St.-Petersburg. 1998. C21.
12. Krivtsov A. M., Hofmann A., Staude J., Klvana M., Bumba V. Determination of the full velocity vector based on vector magnetograph measurements in an asymmetric sunspot // Astronomy & Astrophysics. 1998. V. 335. № 3. P. 1077–1084.
13. Krivtsov A. M. Constitutive Equations of the Nonlinear Crystal Lattice // ZAMM · Z. angew. Math. Mech. 1999. V. 79. № S2. P. 419–420.
14. Krivtsov A. M. Computer Simulation of Spall Crack Formation // Structural Dynamics. EURO-DYN'99. Fryba & Naprstek (eds). 1999. Balkema. Rotterdam. P. 475–477.
15. Krivtsov A. M. Influence of Velocities Dispersion on Spall Strength of Material // ZAMM · Z. angew. Math. Mech. 1999. V. 79. № S2. P. 511–512.
16. Krivtsov A. M. Relation between Spall Strength and Mesoparticle Velocity Dispersion // International International Journal of Impact Engineering. 1999. V. 23. № 1. P. 466–476.
17. Krivtsov A. M., Mescheryakov Y. I. Molecular Dynamics Investigation of the Spall Fracture // Proceedings of SPIE. 1999. V. 3687. P. 205–212.
18. Krivtsov A. M., Wiercigroch M. Dry Friction Model of Percussive Drilling // Meccanica. 1999. V. 34. № 6. P. 425–435.
19. Krivtsov A. M., Wiercigroch M. Nonlinear Dynamics of Percussive Drilling of Hard Materials // CD Proc. of 1999 ASME Int. Design Engineering Techn. Conf.: 17th Biennial Conference on Mechanical Vibration and Noise. Las Vegas, Nevada. DETC99/VIB-8033. 6 p.
20. Krivtsov A. M. Simulating Perforation of Thin Plates Using Molecular

Dynamics Approach. Proc. of International Conference "Shock waves in condensed matter". St.-Petersburg. 2000. P. 158–160.

21. Кривцов А. М. Влияние вращающего момента ограниченной мощности на устойчивость стационарных движений несимметричного волчка // Изв. РАН. МТТ. 2000. № 2. С. 33–43.
22. Кривцов А. М. Описание движения осесимметричного твердого тела в линейно вязкой среде при помощи квазиординат // Изв. РАН. МТТ. 2000. № 4. С. 23–29.
23. Krivtsov A. M., Wiercigroch M. Penetration Rate Prediction for Percussive Drilling // Chaos, Solitons & Fractals. 2000. V. 11. № 15. P. 2479–2485.
24. Wiercigroch M., Krivtsov A.M., Wojewoda J. Dynamics of Ultrasonic Drilling of Hard materials / In Wiercigroch M. and de Kraker A. eds. Applied Non-linear Dynamics and Chaos of Mechanical Systems with Discontinuities. World Scientific. 2000. 403–444.
25. Кривцов А. М. Метод молекулярной динамики и динамики частиц в моделировании сильного неупругого деформирования и разрушения. Аннот. докл. VIII Всероссийского съезда по теоретической и прикладной механике. Пермь. Россия. 2001. С. 368.
26. Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // ДАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.
27. Krivtsov A. M. About Using Moment of Momentum and Angular Velocity Vectors // ZAMM · Z. angew. Math. Mech. 2001. V. 81. № 6. P. 393–403.
28. Krivtsov A. M. Second Order Equation of State for Lennard-Jones Chain // Proceedings of the XXVIII Summer School Actual Problems in Mechanics. St.-Petersburg. Russia. 2001. V. 1. P. 79–90.
29. Krivtsov A. M., Wiercigroch M. Mechanical properties of polycrystal materials, molecular dynamics simulation // Proceedings of the XXVIII Summer School Actual Problems in Mechanics. St.-Petersburg. Russia. 2001. V. 1. P. 71–78.
30. Krivtsov A. M., Wiercigroch M. Molecular dynamics simulation of impact fracture in polycrystalline materials // Book of Abstracts of EUROMECH Colloquium 425: Nonlinear Dynamics, Control and Condition Monitoring. Aberdeen. UK. 2001. P. 39.
31. Krivtsov A. M., Wiercigroch M. Molecular Dynamic Simulation of Mechanical Properties for Polycrystal Materials // Materials Physics and Mechanics. 2001. V. 3. № 1. P. 45–51.
32. Wiercigroch M., Krivtsov A.M. Frictional chatter in orthogonal metal cutting // Philosophical Transactions of the Royal Society A. 2001. V. 359. № 1781. P. 713–738.