Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел

А. М. Кривцов[1,2], И. Б. Волковец[1], П. В. Ткачев[1], В. А. Цаплин[2]

[1]Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
[2]Институт проблем машиноведения РАН

Аннотация

В статье дается обзор работ по моделированию методом динамики частиц высокоскоростного разрушения твердых тел, проводимых при поддержке РФФИ Группой теоретического и компьютерного моделирования материалов с микроструктурой. Рассматриваются задачи по пробитию преград деформируемым ударником, разрушению шара под действием сферической волны растяжения, откольному разрушению при плоском ударном взаимодействии пластин. Приводятся результаты компьютерного эксперимента по моделированию на многопроцессорных вычислительных системах откольного разрушения с использованием более 100 миллионов частиц.

1 Введение

Молекулярному моделированию сплошных сред посвящена обширная литература. Однако, как в зарубежной, так и в отечественной литературе метод молекулярной динамики (ММД) [1] преимущественно используется для исследования физико-химических свойств сплошных сред, в то время как он имеет прекрасные возможности для решения механических задач сильного неупругого деформирования и разрушения. В последнем случае, используемые при моделировании частицы не обязательно представляют собой атомы или молекулы, они могут рассматриваться как элементы более высокого масштабного уровня. Несмотря на это, часто используется традиционное название ММД, однако, в данном случае, более правильно говорить о методе динамики частиц [2].

Метод динамики частиц относительно мало применялся ранее в задачах механики, прежде всего в связи с тем, что он более требователен к мощности вычислительных систем, чем многие континуальные методы. Поясним необходимость использования в расчетах ансамблей, насчитывающих миллионы частиц. Куб с ребром в сто частиц содержит миллион, а с ребром в тысячу — миллиард частиц. Первый случай соответствует нижней границе с точки зрения реалистичности расчетов, второй — верхней границе с точки зрения возможности современных компьютеров. Поэтому наиболее существенные на сегодняшний день результаты получены на ансамблях, насчитывающих десятки и сотни миллионов частиц.

На западе развитие метода динамики частиц происходит параллельно с развитием многопроцессорных вычислительных систем, более того, именно этот метод часто используется для тестирования быстродействия подобных систем. В связи со слабым развитием многопроцессорных вычислительных систем в России, в отечественной науке наметилось отставание по данной тематике. Однако ввод в эксплуатацию вычислительных систем МВС-1000, приближающихся по мощности к показателям крупнейших западных суперкомпьютеров, позволяет в корне изменить эту ситуацию [3]. В частности, ниже будут описаны результаты моделирования на МВС-1000 откольного разрушения в системе, насчитывающей более 100 миллионов частиц (300 миллионов стапеней свободы), что, хотя и уступает результатам, полученным

передовыми западными лабораториями, перешедшими рубеж в миллиард частиц [4], однако позволяет рассчитывать на успешную конкуренцию в ближайшем будущем. В данной статье предлагается обзор работ по моделированию методом динамики частиц высокоскоростного разрушения твердых тел, проводимых при поддержке РФФИ Группой теоретического и компьютерного моделирования материалов с микроструктурой (ИПМаш РАН, С.-Петербург).

2 Метод исследования

Метод динамики частиц основан на представлении материала совокупностью взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), для которых записываются классические уравнения динамики. Взаимодействие частиц описывается посредством потенциалов взаимодействия, основным свойством которых является отталкивание при сближении и притяжение при удалении. Перед началом моделирования задается некоторое начальное распределение частиц в пространстве (исходная структура материала) и начальное распределение скоростей частиц (механическое и тепловое движение системы в исходном состоянии). Далее задача сводится к решению задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

Несомненное преимущество метода частиц по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала. Действительно, использование только простейшего потенциала взаимодействия (например, типа Леннарда-Джонса) позволяет моделировать такие сложнейшие эффекты, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуется отдельная теория, в то время как при моделировании методом частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения. В частности, необратимость механических процессов достигается за счет перехода механической энергии длинноволновых движений материала в тепловую энергию хаотического движения частиц.

Потенциал взаимодействия в динамике частиц играет такую же роль, что и определяющие уравнения в механике сплошной среды. Однако структура потенциала неизмеримо проще, чем у определяющих уравнений, так как он представляет собой скалярную функцию расстояния, в то время как определяющие уравнения представляют собой операторы, в которые входят тензорные характеристики напряженного состояния и деформирования, а также термодинамические величины. Конкретный вид потенциала взаимодействия частиц определяется из сравнения механических свойств компьютерного и реального материалов. Для простейших характеристик, таких как, например, упругие модули, это сравнение может быть проведено аналитически [5, 6, 7]. В остальных же случаях соответствие устанавливается на основе тестовых компьютерных экспериментов.

3 Техника моделирования

Техника моделирования методом динамики частиц описана в работах [1, 2, 5], здесь мы остановимся на ней лишь вкратце. Уравнения движения частиц в простейшем случае имеют вид

$$m\ddot{\underline{r}}_k = \sum_{n=1}^{N} \frac{f(|\underline{r}_k - \underline{r}_n|)}{|\underline{r}_k - \underline{r}_n|} \left(\underline{r}_k - \underline{r}_n\right), \tag{1}$$

где $\underline{r}_k$ — радиус-вектор k-ой частицы, m — масса частицы, N — общее число частиц, $f(r) = -\Pi'(r)$ — сила взаимодействия между частицами, соответствующая потенциалу взаи-

модействия $\Pi(r)$. Одним из наиболее простых и, вместе с тем, часто используемых, является потенциал Леннарда-Джонса

$$\Pi(r) = D\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right], \tag{2}$$

где a — равновесное расстояние для двух частиц, D — энергия связи.

Моделирование методом частиц с математической точки зрения представляет собой решение задачи Коши для уравнений (1). Начальные условия включают в себя координаты и скорости каждой частицы. Генерация начальных условий является отдельной и весьма нетривиальной задачей, так как начальное расположение частиц и их скорости существенно влияют на свойства полученного компьютерного материала. Задание начальных условий происходит на двух масштабных уровнях, которые условно можно назвать макро- и микроскопическим. На макроскопическом уровне задается внешняя форма объектов моделирования и их макроскопические скорости. На микроуровне задается вид упаковки частиц (структура материала) и скорости хаотического движения (тепловое движение). Скорость каждой частицы в начальный момент времени складывается из макроскопической скорости, мало изменяющейся от частицы к частице, и случайной компоненты, получаемой при помощи генератора случайных чисел. Случайная компонента характеризуется девиацией скоростей Δv — заданным значением среднеквадратического отклонения скорости от ее среднего значения, определяющим интенсивность хаотического (теплового) движения.

Введем ряд параметров, которые нам понадобятся в дальнейшем для описания результатов моделирования. Обозначим

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a), \qquad T_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi\sqrt{m/C}, \tag{3}$$

где C — жесткость межатомной связи в положении равновесия, T_0 — период колебаний массы m под действием линейной силы с жесткостью C (микроскопический масштаб времени). В качестве масштаба скорости удобно брать скорость диссоциации:

$$v_d \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2D/m}, \tag{4}$$

представляющую собой минимальную скорость, которую надо сообщить частице массы m, находящейся в равновесии в потенциальном поле с энергией связи D, чтобы она могла уйти на бесконечность. Скорость $v_0 = a\sqrt{C/m}$ распространения длинных волн малой амплитуды в одномерной цепочке при взаимодействии (2) связана со скоростью диссоциации тождеством $v_0 = 6v_d$. Скорость v_l распространения длинных продольных волн в двумерном случае (при идеальной треугольной кристаллической упаковке частиц) равна $v_l = \sqrt{9/8}\,v_0$. В трехмерном случае, при распространении волн вдоль направления [1,0,0] гранецентрированной кубической решетки, v_l совпадает с v_0. Подробнее эти вопросы рассмотрены в [5].

4 Пробитие преград деформируемым ударником

Задачи пробития преград были предметом интенсивных исследований на протяжении нескольких десятилетий [9, 10, 11]. Однако, адекватное описание процесса разрушения при высокоскоростном ударном взаимодействии по-прежнему представляет собой серьезную проблему. Использование существующих моделей разрушения в стандартных численных алгоритмах обычно вызывает проблемы из-за трудности определения микромеханических констант разрушения и серьезного усложнения вычислительных схем [10]. Метод динамики частиц позволяет во многом обойти указанные проблемы, поскольку он фактически не требует использования теоретических моделей разрушения. При моделировании методом частиц разрушение автоматически включается в модель за счет ограниченности расстояния взаимодействия между частицами.

В качестве примера приведем результаты двумерного компьютерного эксперимента по пробитию тонкой пластины остроконечным ударником [12]. В данном расчете для моделирования использовалось относительно небольшое количество частиц, однако именно это позволяет наглядно проиллюстрировать использование метода. На Рис. 1a показано исходное состояние модели: ударник (черный цвет) почти касается пластины (серый цвет), ось

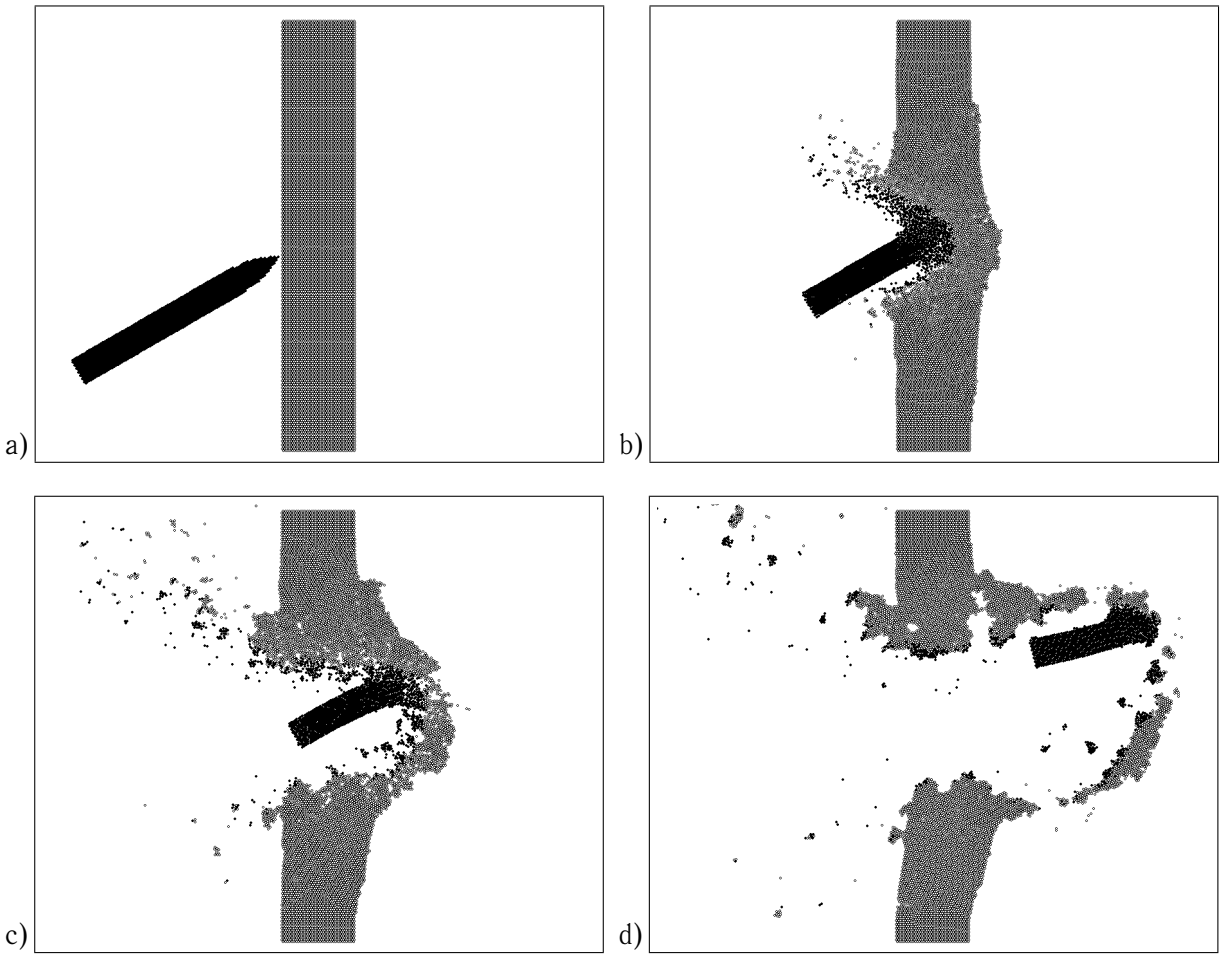


Рис. 1: Пробитие пластины остроконечным ударником.

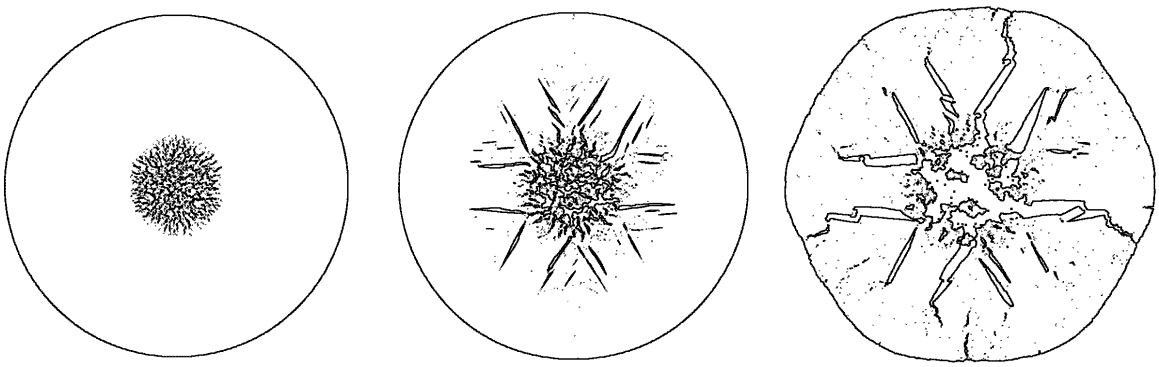
ударника составляет с нормалью к пластине угол в 30°. Частицы упорядочены в двумерную гексагональную решетку, общее число частиц равно 10 000. Для описания взаимодействия частиц используется потенциал Леннарда-Джонса, энергия связи для которого определялась из соответствия откольной прочности компьютерного материала результатам тестов на откольное разрушение для вязких высокопрочных сталей [8, 13]. Скорость ударника в пять раз превосходит скорость диссоциации для потенциала Леннарда-Джонса, что приблизительно соответствует скорости 1.3 км/с для стали. Отношение длины ударника к его диаметру составляет 8.6, к толщине пластины — 3.1. Рис. 1a–d показывают последовательные этапы процесса пробития, соответствующие моментам времени 0, 8, 19 и 42 мкс от начала удара. Наглядно видны разрушение ударника, формирование кратера в мишени и образование осколков. Отметим также изменение направления скорости ударника в ходе процесса пробития. Несмотря на грубость модели, указанные эффекты находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными данными [10, 11].

5 Разрушение шара под действием сферической волны растяжения

Сферически сходящиеся волны сжатия способны создавать в материале высочайшие концентрации напряжений, что позволяет экспериментально исследовать поведение материалов в экстремальных условиях [14]. При подобном нагружении в центре шара образуется зона чрезвычайно высоких давлений и температур, что в дальнейшем приводит к образованию концентрической полости. С другой стороны, относительная простота деформированного состояния делает возможным и аналитическое исследование происходящих при этом процессов [15, 16].

В данной работе рассматривается аналогичная задача, однако исследуется сферически сходящаяся волна растяжения. В этом случае также происходит разрушение центральной области шара и образование концентрической полости, однако в отличие от воздействия волны сжатия, при этом не происходит значительного разогревания материала, то есть разрушение является "холодным". Реализация подобного нагружения осуществляется следующим образом: шар изначально находится в однородно сжатом состоянии, затем происходит мгновенное снятие внешней нагрузки, что приводит к возникновению у поверхности волны разгрузки, распространяющейся к центру шара.

Задача рассматривается в двумерной постановке. Изначально частицы упорядочены в идеальную треугольную решетку, формирующую в плоскости круг содержащий более полмиллиона частиц ($N = 501\,236$). В исходном состоянии каждая частица получает малую случайную скорость, так, что средняя кинетическая энергия теплового движения, приходящаяся на частицу, составляет 0.9% от энергии связи. В исходном состоянии шар сжат на 4.2% по отношению к равновесному состоянию.



a) $t = 1.06\,t_0$ b) $t = 1.45\,t_0$ c) $t = 3.39\,t_0$

Рис. 2: Последовательные этапы разрушения шара.

Последовательные этапы разрушения шара, полученные в результате расчета методом частиц, показаны на Рис. 2. В качестве масштаба времени выбрано t_0 — время, необходимое продольной волне для прохождения расстояния, равного радиусу шара: $t_0 = R/v_l$, где v_l — скорость распространения длинных продольных волн малой амплитуды в идеальной треугольной кристаллической решетке, R — радиус шара.

Согласно результатам компьютерного эксперимента разрушение шара под действием сходящейся волны растяжения можно разделить на три последовательных этапа. Первый этап начинается вскоре после достижения волной центра шара — Рис. 2a. При этом в центральной области начинается разрушение материала за счет роста пор и микротрещин. Второй этап разрушения наступает с появлением прямолинейных трещин с гладкими берегами, быстро распространяющихся в кристаллографических направлениях, наиболее близких к радиаль-

ным — Рис. 2b. При этом каждая трещина растет строго в одном направлении, без малейших отклонений. На третьем этапе разрушения характер распространения трещин резко изменяется. На Рис. 2c видно, что вершины практически всех трещин изменили направление движения — избирается смежное кристаллографическое направление, что приводит к повороту на 60°. Дальнейшее продвижение трещины происходит с постоянной сменой направления, что приводит к образованию сильно искривленных трещин с неровными берегами. На этом этапе в центральной части образца образуется внутренняя полость — Рис. 2c. При выходе трещин на поверхность может произойти фрагментация. Отклонение от сферической симметрии в форме образца на Рис. 2c связано с анизотропией кристаллической упаковки, проявляющейся при сильном деформировании.

Таким образом, рассмотренный компьютерный эксперимент позволил проследить процесс разрушения предварительно сжатого шара при внезапном снятии нагрузки. Выявлено три различных механизма разрушения, последовательно сменяющие друг друга с течением времени и реализующиеся в определенных областях образца. Различие в механизмах разрушения связаны, прежде всего, с различной скоростью деформирования на различных этапах процесса. В результате того, что разрушение происходило под действием волн растяжения, не происходило разогрева материала, что привело к значительно более хрупкому разрушению материала, чем в случае ударного сжатия [14, 15]. Более подробно данная задача рассмотрена в [17].

6 Моделирование откольного разрушения

Эксперименты по откольному разрушению позволяют создавать чрезвычайно высокие нагрузки при простейшем одноосном деформировании, что делает подобные эксперименты важнейшим инструментом для проверки и тестирования общих методов моделирования материалов [18]. На Рис. 3 приведена схема компьютерного эксперимента по откольному разрушению. Частицы образуют два прямоугольника, лежащих в плоскости xz. Прямоугольники моделируют собой сечения ударника (верхний прямоугольник) и мишени (нижний прямоугольник). Изначально частицы упорядочены в треугольную решетку, одинаковую для удар-

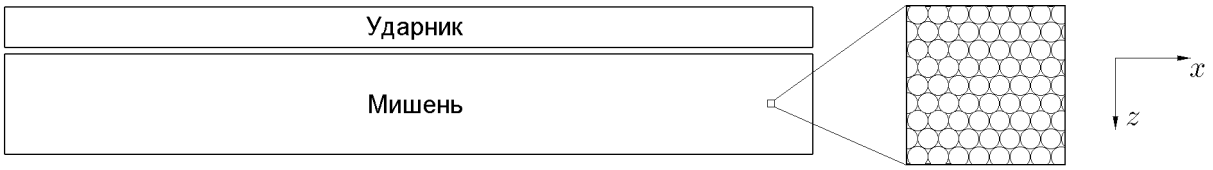


Рис. 3: Схема компьютерного эксперимента.

ника и мишени. На Рис. 3 решетка ориентирована таким образом, чтобы один из ее базисных векторов был направлен вдоль оси x. На всех внешних границах используются свободные граничные условия. Изначально мишень имеет нулевую скорость, ударник имеет скорость, направленную вдоль оси z в сторону мишени. Ударник и мишень сформированы одинаковыми частицами. Общее число частиц около 30 тысяч. Состояние мишени и ударника после компьютерного эксперимента показано на Рис. 4. Хорошо видна откольная трещина, образовавшаяся в мишени. Из рисунка следует, что границы откольной трещины в центральной части мишени абсолютно ровные. Это следствие низкого уровня тепловой энергии, а также совпадения кристаллических решеток ударника и мишени. На Рис. 4 наблюдается множественный откол, который часто возникает при достаточно высоких скоростях ударника [9]. Вблизи боковых поверхностей образца наблюдается специфическая локализация разрушения, вызванная отражением волн от свободных поверхностей образца.

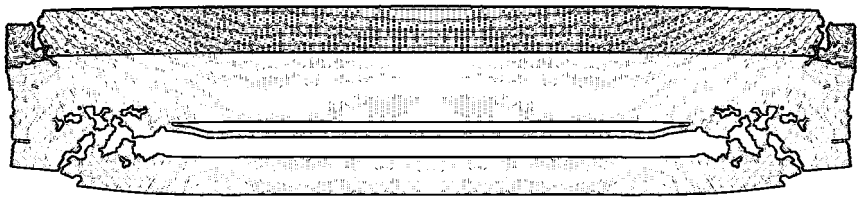


Рис. 4: Образование откольной трещины.

Далее будет использоваться параметр $t_s \stackrel{\text{def}}{=} h/v_l$, где h — суммарная толщина ударника и мишени, v_l — скорость распространения длинных волн малой амплитуды. Величина t_s приближенно равна времени, проходящему с момента удара до начала откольного разрушения. Сила удара и характер разрушения могут приводить к отклонениям, однако тем не менее величину t_s удобно брать в качестве макроскопического масштаба времени в компьютерных экспериментах по откольному разрушению.

Минимальная скорость ударника, необходимая для возникновения откольного разрушения в мишени (далее — откольная скорость), для идеального монокристаллического образца мало зависит от соотношения толщин ударника и мишени и в двумерном случае приближенно равна скорости диссоциации v_d. На Рис. 5 приведены значения откольной скорости для различного количества частиц, формирующих образец, и различных соотношений между толщинами ударника и мишени. Результаты, представленные на Рис. 5, получены из двумерных компьютерных экспериментов. При расчете использовалась идеальная треугольная

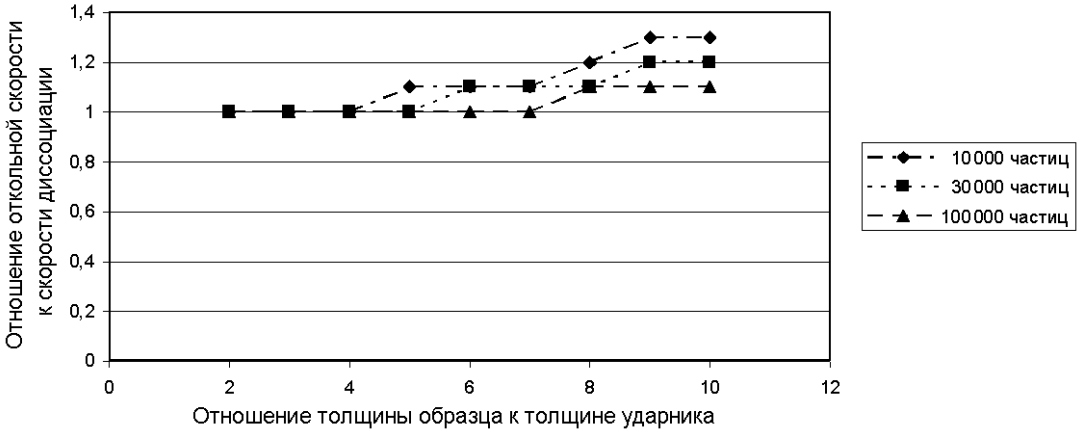


Рис. 5: Зависимость откольной скорости от параметров компьютерного эксперимента.

упаковка частиц, ориентированная аналогично Рис. 3. Для устранения погрешности, связанной с отражением волн от боковых поверхностей, в направлении, перпендикулярном удару, использовались периодические граничные условия. Согласно Рис. 5, при увеличении числа частиц откольная скорость стремится к скорости диссоциации. Это позволяет использовать скорость диссоциации как параметр, устанавливающий связь между микро- и макрохарактеристиками системы. В трехмерном случае откольная скорость отличается от v_d, однако их отношение, по-прежнему, мало зависит от геометрии образца.

Моделирование откольного разрушения при помощи двумерных монокристаллических упаковок рассматривалось ранее рядом авторов [8, 19, 20, 21]. Использование многопроцессорных вычислительных систем позволило на несколько порядков повысить число частиц, используемых при моделировании. Рассмотрение столь больших ансамблей частиц вызвано необходимостью развития существующих алгоритмов в следующих двух направлениях:

1. Двумерное моделирование поликристаллических материалов.

2. Полномасштабное трехмерное моделирование монокристаллических материалов.

В следующих параграфах мы остановимся на этих задачах подробнее.

7 Откольное разрушение в двумерных поликристаллических материалах

Одна из основных проблем в применении метода частиц и молекулярной динамики (далее МД) для моделирования макроскопического поведения твердых тел состоит в том, что любые регулярные упаковки частиц приводят к анизотропным компьютерным материалам. Если и возможно подобрать потенциалы взаимодействия таким образом, чтобы модули упругости в рамках линейной теории соответствовали изотропному материалу, то для неупругих и прочностных характеристик материала это сделать невозможно. Видимо именно поэтому МД, широко применяющаяся для моделирования кристаллических материалов, по-прежнему имеет очень ограниченное применение в моделировании изотропных твердых тел.

Подход, позволяющий решить эту проблему, состоит в конструировании неидеальных упаковок частиц, в частности поликристаллических упаковок со случайным распределением ориентации монокристаллов. Этот метод позволяет создать изотропные компьютерные материалы, удовлетворяющие широкому спектру механических, термодинамических и физических свойств. 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 резким увеличением мощности современных компьютеров. Последние достижения в нанотехнологиях также стимулировали МД исследования в области нанокристаллических материалов [22].

Нашей группой разработаны различные способы создания поликристаллических упаковок частиц, получаемых в ходе моделирования методом динамики частиц [23, 24]. На Рис. 6 показана исходная структура поликристаллического компьютерного образца, содержащего пол-миллиона частиц. Для визуализации внутренней структуры образца на Рис. 6 показа-

Рис. 6: Исходная поликристаллическая структура образца.

ны только частицы, принадлежащие границам зерен. Формирование трещины в процессе откольного разрушения в данном образце приведено на Рис. 7. Сравнение Рис. 4 и Рис. 7 демонстрирует принципиально разный механизм разрушения при использовании моно- и поликриталлических упаковок частиц. В монокристалле при низком уровне теплового движения образуется магистральная трещина с идеально ровными краями. В поликристалле вместо этого образуется большое число меньших трещин с неровными краями, преимущественно повторяющими границы зерен. Ширина трещин в поликристаллическом материале меньше, однако их положение и ориентация имеют широкий разброс, в результате чего разрушение покрывает значительно более широкую область, чем в монокристаллическом материале.

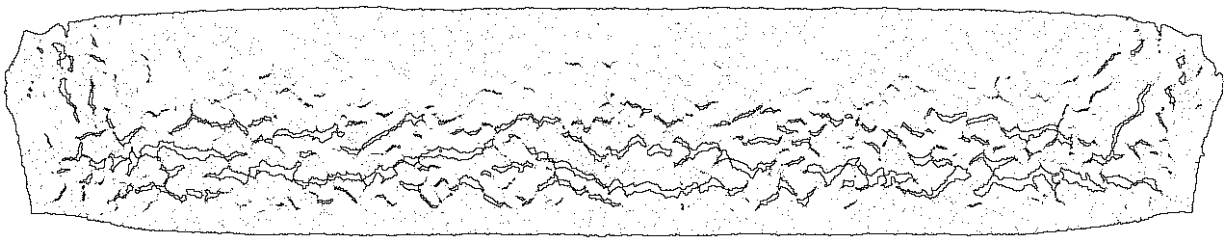


Рис. 7: Образование откольной трещины в поликристаллическом образце.

Это хорошо согласуется с выводом [20], что дефекты, связанные с границами зерен, могут привести к снижению остроты фронта ударной волны в материале. Аналогичный результат был получен в [8], где диффузия фронта ударной волны была вызвана тепловым движением частиц. Использование неидеальных упаковок частиц необходимо для моделирования пластических эффектов при распространении ударных волн, в частности для описания разделения ударной волны на упругий предвестник и пластический фронт. Более подробно эти вопросы рассмотрены в [23, 24].

8 Откольное разрушение в трехмерных монокристаллических материалах

Компьютерное моделирование трехмерных объектов и процессов требует значительно больше вычислительных ресурсов, чем двумерное моделирование. Дополнительная сложность состоит в визуализации результатов компьютерных экспериментов, которая в трехмерном случае представляет собой отдельную задачу. С другой стороны, во многих случаях двумерное моделирование позволяет получить реалистичные результаты и может быть использовано практически без потери общности. Однако, существует множество эффектов, которые принципиально не могут быть описаны в двумерном случае.

В данном параграфе рассмотрим результаты компьютерного эксперимента по откольному разрушению при плоском ударном взаимодействии двух цилиндрических образцов. Исследование кинетики процессов, происходящих в зоне образования откольной трещины, требует рассмотрения чрезвычайно больших ансамблей частиц, что возможно только при использовании многопроцессорных вычислительных систем.

На Рис. 8–9 приведено сравнение компьютерных экспериментов по откольному разрушению при двумерном и трехмерном моделировании. Для двумерного эксперимента показан весь образец, для трехмерного — приведено сечение, проходящее через центр образца, имеющего форму цилиндра. Параметры, использованные при расчете, перечислены в таблице 1. При двумерном моделировании частицы упорядочены в треугольную решетку, ориентированную согласно Рис. 3. В трехмерном случае использована гранецентрированная кубическая (ГЦК) упаковка частиц, удар производится вдоль направления [1,0,0] (ребра кубической подрешетки). В обоих случаях взаимодействие частиц описывается потенциалом Леннарда-Джонса (2). Согласно таблице 1, для достижения примерно одного и того же масштаба (отношение d/a) при трехмерном моделировании потребовалось использовать около 100 миллионов частиц, в то время как при двумерном моделировании использовалось лишь 100 тысяч частиц. Сравнение Рис. 8 и Рис. 9 показывает, что при внешней схожести результатов экспериментов имеются и существенные различия. Прежде всего это относится к краевому эффекту — характеру деформирования образца вблизи его боковых поверхностей. Кольцевые напряжения, отсутствующие при двумерном моделировании, играют существенную роль в трехмерном случае, что приводит к изменению характера деформирования и разрушения по

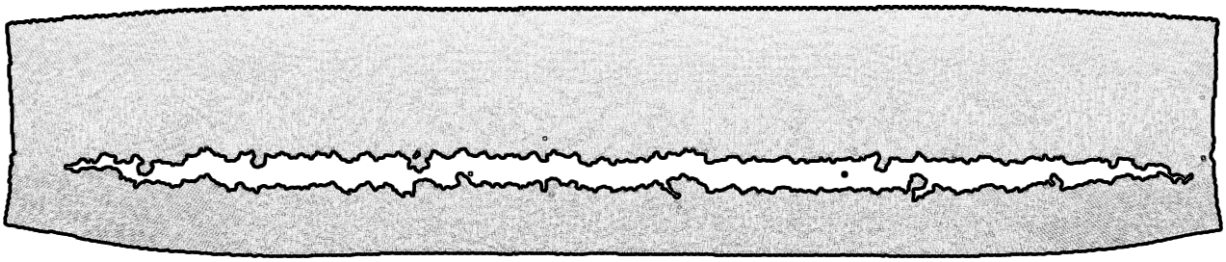


Рис. 8: Образование откольной трещины в двумерной модели, содержащей 100 тысяч частиц.

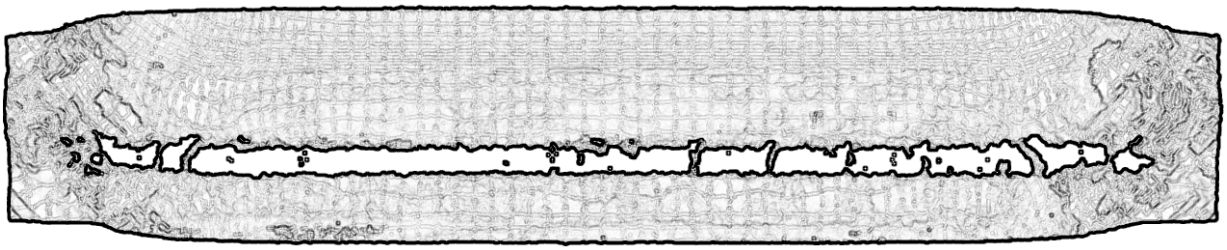


Рис. 9: Образование откольной трещины в трехмерной модели, содержащей 100 миллионов частиц (сечение образца).

Параметр	Символ	Значение	Значение
Эксперимент		2D	3D
Точное число частиц	N	102 030	103 441 607
Кристаллическая решетка	—	Треугольная	ГЦК
Скорость ударника	v_{imp}	$1.05\,v_d$	$1.80\,v_d$
Начальная девиация скоростей частиц	Δv_0	$0.16\,v_d$	$0.16\,v_d$
Радиус обрезания потенциала	a_{cut}	$2.1\,a$	$2.1\,a$
Диаметр образца	d	$708\,a$	$783\,a$
Толщина образца / диаметр образца	h/d	0.17	0.17
Толщина ударника / толщина мишени	h_1/h_2	0.40	0.50
Шаг интегрирования	Δt	$0.03\,T_0$	$0.02\,T_0$
Время расчета	$t_{\max}$	$3\,t_s$	$1.5\,t_s$

Таблица 1: Расчетные параметры при двумерном (2D) и трехмерном (3D) моделировании откольного разрушения.

краям образца. Различается также структура откольной трещины — в трехмерном компьютерном эксперименте она более регулярна, края трещины ровнее, чем в двумерном. С другой стороны, в трехмерном случае образуются вертикальные волокна, соединяющие берега откольной трещины (Рис. 9), отсутствующие на Рис. 8. Отметим также, что скорость ударника, требуемая для достижения откола той же интенсивности, в двумерном случае значительно ниже, чем в трехмерном — см. таблицу 1.

На Рис. 10 показан полностью трехмерный образец. Для улучшения визуализации на Рис. 10 изображены только частицы, прилегающие к поверхности, как внешней, так и внутренней, образовавшейся в ходе откольного разрушения. Формально это реализуется таким образом, что отображаются только частицы, имеющие на расстоянии $1.2a$ менее 8 соседей. Кроме того, на Рис. 10 показано увеличение внутренней области образца в районе образования откольной трещины. На увеличенном фрагменте хорошо видна структура упомянутых выше (Рис. 8) вертикальных волокон, соединяющих берега откольной трещины. Полученные результаты трехмерного моделирования хорошо согласуются с экспериментальными [25, 26] и численными [27] исследованиями откольного разрушения.

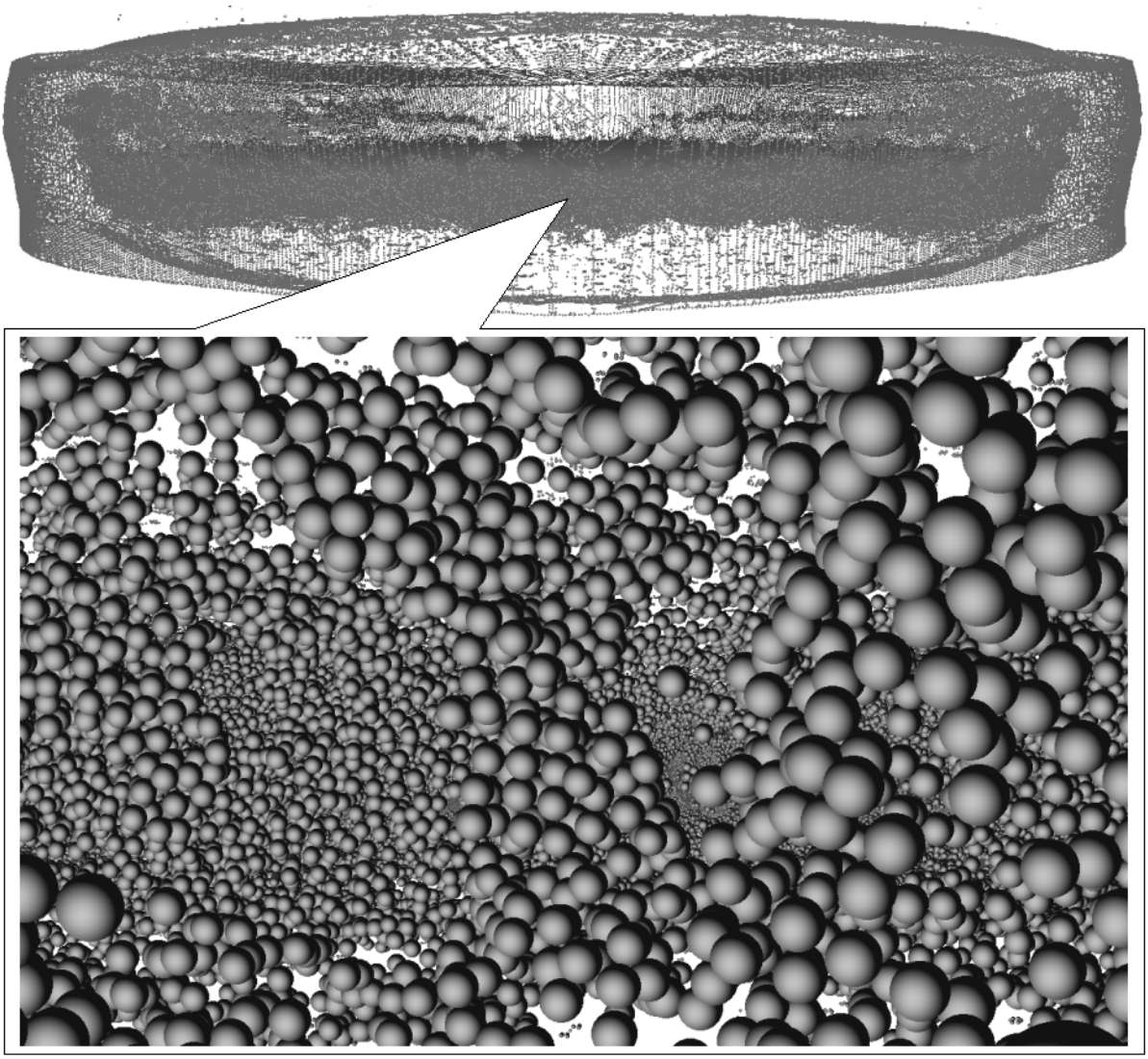


Рис. 10: Откольное разрушение в трехмерной модели, содержащей 100 миллионов частиц.

9 Заключение

Предложенные результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными и численными исследованиями высокоскоростного разрушения твердых тел. Однако, в отличие от эксперимента и классических континуальных методов, метод динамики частиц дает уникальную возможность проследить за динамикой разрушения как на макро- так и на микроуровне. В результате осреднения значений координат и скоростей частиц возможно получить как континуальные уравнения, описывающие динамику с точки зрения механики сплошной среды, так и исследовать кинетику разрушения. Ансамбли частиц, доступные в настоящее время для исследования благодаря развитию вычислительной техники и многопроцессорных вычислительных систем достаточно велики, чтобы сделать возможным исследование процессов, протекающих в твердых телах на нескольких масштабных уровнях. Это демонстрируют проведенные при поддержке РФФИ расчеты откольного разрушения с использованием более 100 миллионов частиц. Дальнейшее развитие алгоритмов может позволить увеличить эти показатели даже при существующей вычислительной технике, а в перспективе развитие вычислительных систем позволит сделать мультимасштабное моделирование неотъемлемой

частью расчетов в механике деформируемого твердого тела. Важную роль здесь должны сыграть и гибридные подходы, основанные на совместном использовании континуальных и дискретных методов. В этом случае, например, метод конечных элементов используется в области, где деформации и напряжения относительно невелики, а в зоне, где происходит нарушение континуальности за счет сильного деформирования и разрушения, используется метод динамики частиц или молекулярной динамики.

Данные исследования поддержаны РФФИ, грант 02-01-00514.

Список литературы

[1] Allen M. P. and Tildesley A. K. Computer simulation of liquids. – Oxford: Clarendon Press. 1987.

[2] Hockney R. W. and Eastwood J. W. Computer simulation using particles – IOP Publishing. 1988.

[3] Забродин А. В. Супер ЭВМ МВС-100, МВС-1000 и опыт их использования при решении задач механики и физики // Математическое моделирование. 2000. Т. 12. № 5.

[4] Abraham F. F, Walkup R., Gao H., Duchaineau M., De La Rubia T. D., Seager M. Simulating materials failure by using up to one billion atoms and the world's fastest computer: Work-hardening. Proceedings of National Academy of Sciences (USA). 2002. V. 99. № 9. P. 5783–5787.

[5] Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал. 2002. Т. 3. № 2. С. 254–276.

[6] Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Докл. РАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.

[7] Krivtsov A. M. From nonlinear oscillations to equation of state in simple discrete systems // Chaos, Solitons & Fractals. 2002. V. 17. № 1. P. 79–87.

[8] Krivtsov A. M. Relation between spall strength and mesoparticle velocity dispersion // International Journal of Impact Engineering. 1999. V. 23. № 1. P. 466–476.

[9] Фомин В. М., Гулидов А. И., Сапожиков Г. А. и др. Высокоскоростное взаимодействие тел. – Новосибирск: Издательство СО РАН. 1999. 600 с.

[10] Anderson C. E., Hohler Jr. V., Walker J. D., and Stilp A. J. Time-resolved penetration of long rods into steel targets // International Journal of Impact Engineering. 1995. V. 16. № 1. P. 1–18.

[11] Johnson G. R., Stryk R. A., Holmquist T. et al. Recent EPIC code development for high velocity impact: 3D element arrangement and 2D fragment distributions // International Journal of Impact Engineering. 1990. V. 10. P. 281–294.

[12] 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.

[13] Mescheryakov Y. I. and Divakov A. K. Multiscale kinetics of microstructure and strain-rate dependence of materials // DYMAT J. 1994. № 4. P. 271–287.

[14] Kozlov E. A. Experimental verification of E. I. Zababakhin hypothesis concerning limitation of energy cumulation in the spherically converging shock wave front in medium with phase transitions. Proc. of APS 1991 Topical Conference on Shock Compression on Condensed Matter, Williamsburg, Virginia, USA. P. 3–11.

[15] Морозов Н. Ф., Бригаднов И. А., Индейцев Д. А., Петров Ю. В, Фрейдин А. Б. Энергетические оценки фазовых превращений в шаре под действием сферически сходящейся волны сжатия // Докл. РАН. 2001. Т. 377. № 6. С. 1–3.

[16] Brigadnov I. A., Freidin A. B., Indeitzev D. A., Morozov N. F., Petrov Yu. V. Energy estimations of phase transformations under the action of a spherically converging compression wave // Mater. Phys. Mech. 2001. № 3. P. 21–24.

[17] Кривцов А. М. Исследование методом частиц разрушения шара под действием сферической волны растяжения. С. 173–178 / Проблемы механики деформируемого твердого тела: Межвузовский сборник посвященный 70-летию академика Н. Ф. Морозова. С.-Петербург: СПбГУ, 2002. 318 с.

[18] Rajendran A. M., Grove D. J. Modeling the shock response of silicon carbide, boron carbide and titanium diboride // International Journal of Impact Engineering. 1996. V. 18. № 6. P. 611–631.

[19] Krivtsov A. M., Mescheryakov Y. I. Molecular dynamics investigation of the spall fracture // Proceedings of SPIE. 1999. V. 3687. P. 205–212.

[20] Wagner N. J., Holian B. L., Voter A. F. Molecular-dynamics simulations of 2-dimensional materials at high-strain rates // Physical Review A. 1992. V. 45. № 12. P. 8457–8470.

[21] Morrey W. C., Wille L. T. Molecular dynamics simulations of spallation in metals and alloys // Computational Materials Science. 1998. V. 10. № 1–4. P. 432–435.

[22] Schiotz J., Vegge T., Di Tolla F. D., Jacobsen K. W. Atomic-scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystal metals // Physical Review B. 1999. V. 60. № 17. P. 11971–11983.

[23] 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.

[24] Krivtsov A. M. Molecular dynamics simulation of impact fracture in polycrystalline materials // Meccanica, accepted.

[25] 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. P. 1435–1457.

[26] Chevrier P., Klepaczko J. R. Spall fracture: Mechanical and microstructural aspects // Engineering Fracture Mechanics. 1999. V. 63. № 3. P. 273–294.

[27] Hanim S., Klepaczko J. R. Numerical study of spalling in an aluminum alloy 7020-T6 // International Journal of Impact Engineering. 1999. V. 22. № 7. P. 649–673.