

ОБ ЭФФЕКТЕ ПЫЛЕНИЯ В МЕТОДЕ КЛАСТЕРНОЙ ДИНАМИКИ

Д. В. Цаплин, В. Н. Пискунов, Р. А. Веселов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Метод кластерной динамики (КД) [1, 2] является одной из разновидностей метода частиц [3], который предназначен для моделирования процессов сильной деформации и динамического разрушения материала при импульсном нагружении с характерными скоростями относительной деформации 10^3 – 10^6 с⁻¹.

Метод частиц имеет ряд преимуществ по сравнению с решением уравнений макроскопической механики для сплошной среды. Особенно это актуально для процессов, сопровождающихся сильным изменением геометрии вплоть до нарушения сплошности (связности) рассматриваемой области, поскольку такие задачи представляют значительную трудность для численного интегрирования непрерывных уравнений механики сплошной среды. Наоборот, в методе частиц с самого начала предполагается дискретная структура среды, в виде совокупности конечного числа взаимодействующих элементов (частиц), поэтому нет принципиальных проблем с описанием процессов разрушения, нарушения сплошности, изменения структуры и др.

Существуют различные реализации метода частиц. Среди тех, в которых за основу взяты уравнения движения самих частиц, определяемые потенциалом взаимодействия между ними, в первую очередь следует отметить метод молекулярной динамики (МД) [4, 5]. Этот метод интенсивно развивается и используется для моделирования свойств физических, химических и биологических объектов с размером до сотен нанометров.

Очевидно, что для описания макроскопических объектов непосредственное использование МД ограничивается возможностями вычислительной техники. Поэтому в качестве частиц целесообразно выбирать не молекулы, а элементы более крупного масштабного уровня, например зерна материала (метод подвижных клеточных автоматов [6], метод динамики частиц [7, 8] и перидинамика [9, 10]).

Метод кластерной динамики [1, 2] во многом основан на перечисленных подходах и использует их преимущества. Одно из важнейших применений метода кластерной динамики – это изучение процессов разрушения, кумуляции и пробития материалов. Среди задач разрушения (диспергирования) материала отдельный интерес представляет процесс пыления – выброса мелкодисперсных частиц при выходе ударной волны на свободную поверхность.

Обычно главной причиной пыления считается шероховатость поверхности, за счет которой обра-

зуются локальные отколы и струйки вещества. При упругопластическом описании [11, 12] отколы с гладкой нагружаемой поверхности возникают, когда за фронтом УВ давление и скорость не постоянны, а падают, поскольку только в этом случае в волне разгрузки формируются отрицательные давления. Как отмечается в [11], размеры диспергированных при этом частиц могут определяться зеренной структурой материала.

В методе КД разрушение обусловлено разрывами связей между кластерами, поэтому привлекательно его применение для описания процесса пыления, обусловленного неоднородностями внутренней структуры материала – в частности, зёрнами и дефектами структуры. Однако, отрыв приграничных частиц от поверхности в методе КД может иметь место из-за нелинейности процесса колебания кластеров, возбужденных УВ. Заранее не ясно, насколько велик этот побочный эффект для нагружения однородного материала с гладкой поверхностью плоской УВ (без профиля давлений). По физическому смыслу диспергирование вещества в этом случае должно быть пренебрежимо мало, иначе под сомнение ставятся критерии механики сплошной среды.

Особенно удобным для методических расчетов и выделения причин пыления является процесс выхода УВ на идеально гладкую поверхность. Для этой задачи наиболее показательны трехмерные расчеты для поликристаллических сред, но предварительно необходим тщательный анализ поведения кластеров на поверхности монокристаллического образца.

Данная работа посвящена изучению процесса пыления в методе КД, а именно анализу причин появления счетных эффектов в задачах диспергирования и отделению этих эффектов от реальных. В разделе 1 представлены результаты трехмерных расчетов задачи о пылении со свободной гладкой поверхности однородного образца после выхода плоской УВ, показывающие, что количество пыли может значительно превышать оценки в единичный слой кластеров. Это означает, что в методе КД процесс пыления обусловлен не только физическими причинами, но и побочными счетными эффектами.

В разделе 2 разработана одномерная модель, позволяющая выяснить методические вопросы по движению кластеров при распространении возмущений, в т. ч. вызванных движением границы и ангармоничностью межчастичного потенциала. Выполнены расчеты о прохождении УВ по цепочке кластеров и ее выходу на свободную границу, при этом основное

внимание обращено на поведение приграничных кластеров, обусловленное этими процессами. Показано, что при больших скоростях нагружения за счет ангармоничности потенциала взаимодействия происходит отрыв большого числа поверхностных кластеров, а для гармонического потенциала этот отрыв практически отсутствует.

Раздел 3 посвящен анализу побочных эффектов, влияющих на процесс диспергирования в методе КД. Подробно исследовалось поведение приграничных кластеров в одномерной цепочке после выхода УВ с ангармоническим и гармоническим потенциалами взаимодействия. Показано, что важную роль в побочных эффектах пыления играет самая высокочастотная мода колебаний решетки кластеров (с движением соседей в противофазе), которая появляется только для ангармонического потенциала. Учитывая этот факт, был сформулирован критерий, позволяющий (с точностью до эмпирического множителя) оценить пороговую скорость нагружения u_{cr} (скорость за фронтом УВ), при которой возникает пыление в реальных трехмерных задачах.

В разделе 4 выполнены расчеты диспергирования частиц в одномерной модели с дальнедействующим потенциалом взаимодействия кластеров. Результаты этих расчетов показали, что введение дальнедействующих потенциалов явно улучшает ситуацию, но не позволяет полностью подавить счетные эффекты пыления. В разделе 5 представлен подход, позволяющий устранить эти эффекты путем модификации уравнений движения, а именно, добавления сил торможения, пропорциональных относительным скоростям частиц. С помощью расчетов на одномерной модели показана эффективность предложенного подхода, применение которого полностью устраняет побочные эффекты пыления и сохраняет основные физические закономерности процесса нагружения и дальнейшего движения системы.

Реализация этого подхода описана в разделе 6, где представлены результаты трехмерных расчетов о распространении плоской УВ в образце с модифицированными уравнениями движения кластеров, показывающие, что введенные силы торможения устраняют побочные эффекты пыления и мало меняют динамику движения волн в системе. Предложенный способ может использоваться в дальнейшем, как при решении практических задач, так и для отделения физических эффектов от счетных, например, при исследовании процессов выхода УВ на свободную границу поликристаллического образца.

Авторы выражают благодарность И. А. Давыдову и С. В. Копкину за обмен мнениями и обсуждение полученных результатов.

1. Исследование пыления в трехмерных расчетах

В основе метода КД лежат следующие предположения [1, 2]:

- представление сплошной среды в виде набора выделенных структурных элементов (точечных базовых кластеров);

- замена уравнений механики сплошной среды на уравнения движения взаимодействующих кластеров;

- применение метода молекулярной динамики для описания динамики движения кластеров;

- выбор потенциалов взаимодействия кластеров, исходя из реального уравнения состояния (УРС) моделируемого материала.

В случае парного взаимодействия кластеров с силой, действующей по направлению радиуса вектора между частицами, их уравнения движения имеют вид

$$m\ddot{\vec{r}}_k = \sum_{n=1}^N \frac{f(|\vec{r}_k - \vec{r}_n|)}{|\vec{r}_k - \vec{r}_n|} (\vec{r}_k - \vec{r}_n), \quad (1)$$

где \vec{r}_k – радиус-вектор k -й частицы, m – ее масса; N – полное число частиц; $f(r) = -dV(r)/dr$ – сила взаимодействия между частицами, соответствующая потенциалу взаимодействия $V(r)$.

Как упоминалось выше, в методе КД разрушение обусловлено разрывами связей между кластерами. Однако, отрыв приграничных частиц от поверхности в методе КД может иметь место из-за нелинейности процесса колебания кластеров, возбужденных УВ. Чтобы определить, насколько велик этот побочный эффект, выполнены трехмерные расчеты модельной задачи о пылении со свободной гладкой поверхности однородного образца после выхода плоской УВ. Такая постановка удобна для методических расчетов и выяснения причин пыления, поскольку, по физическому смыслу, диспергирование вещества в этом случае должно быть пренебрежимо мало.

Чтобы правильно передать эффекты разрушения материалов в методе КД, вводится радиус отсечки межчастичного потенциала R_c , при превышении которого кластеры не взаимодействуют ($f(r) = 0$ при $r > R_c$). Выбор величины радиуса отсечки в принципе определяется удельной энергией разрушения материала. Трехмерные расчеты пыления с гладкой поверхности однородного алюминиевого образца после выхода плоской УВ проводились для различных радиусов отсечки. В этих расчетах варьировалась массовая скорость за фронтом УВ – u (скорость нагружения). Размер кластеров равнялся $a = 10^{-5}$ м. Длина образца вдоль распространения УВ составляла 5 мм, границы в этом направлении были свободными. Размеры в других направлениях, имеющих периодические граничные условия, равнялись двум периодам решетки (рис. 1). Левая граница счетной области двигалась с заданной скоростью u , создавая нагружение на образец.



Рис. 1. Постановка трехмерных расчетов модельной задачи о пылении с гладкой поверхности однородного алюминиевого образца после выхода плоской УВ

Из результатов расчетов с различными массовыми скоростями за фронтом УВ следует, что процесс диспергирования носит пороговый характер и обладает нерегулярностью по отношению к основным параметрам задачи. Например, на рис. 2 показана зависимость числа диспергированных кластеров от скорости нагружения для радиуса отсечки $R_c = 1,1$.

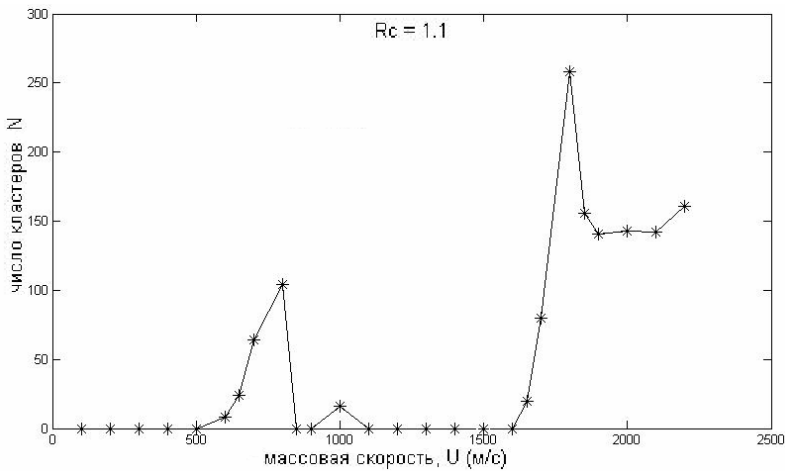


Рис. 2. Зависимость числа диспергированных кластеров от массовой скорости u за фронтом УВ при $R_c = 1,1$

Основные расчеты проведены для кластеров с размерами 10 мкм, изменение этого размера до 5 мкм практически не повлияло на количество кластеров пыли. Тем самым, масса вещества, диспергированного с единицы площади, будет убывать обратно пропорционально размеру кластера, но реальное устранение эффекта пыления произойдет лишь для субмикронных кластеров.

Особенно важны результаты расчетов процесса пыления для гармонического потенциала взаимодействия. В этих расчетах процесс пыления либо совсем отсутствует, либо содержит небольшое число кластеров. Таким образом, на пыление с гладкой поверхности однородного образца после выхода плоской УВ в методе КД сильное влияние оказывает ангармоничность потенциала взаимодействия кластеров.

2. Исследование процесса пыления с помощью одномерной модели

Многие методические вопросы по движению кластеров при распространении возмущений, в т. ч. вызванных движением границы и ангармоничностью потенциала, можно исследовать на одномерной цепочке кластеров. В первую очередь мы имеем в виду задачу о прохождении плоской УВ по цепочке и ее выходе на свободную границу, при этом основное внимание обращено на поведение приграничных кластеров.

Видно, что число кластеров пыли ведет себя немонотонно с увеличением массовой скорости за фронтом волны. Для достаточно сильных УВ диспергирование материала значительно превышает единичный слой кластеров, а в целом относительная масса материала в дисперсной фазе составила несколько процентов от полной массы образца.

Будем считать, что в начальный момент кластеры находятся в положении равновесия, поэтому исходные положения частиц

$$x_i(0) = ia, \quad i = 0, 1, \dots, I, \quad (2)$$

где $x_i(t)$ – координата i -го кластера в момент времени t , $I + 1$ – число кластеров в цепочке и a – равновесное расстояние между кластерами. Если рассматривать парное взаимодействие только между ближайшими соседями, то уравнения движения частиц:

$$m\ddot{x}_i = f(x_{i+1} - x_i) - f(x_i - x_{i-1}), \quad \text{для } i = 1, 2, \dots, I-1, \quad (3)$$

где m – масса кластера, $f(x)$ – сила взаимодействия, зависящая от расстояния между кластерами x . Для крайних кластеров уравнения другие

$$m\ddot{x}_0 = f(x_1 - x_0); \quad m\ddot{x}_I = -f(x_I - x_{I-1}), \quad (4)$$

поскольку соседи либо справа, либо слева отсутствуют. Отметим, что именно уравнения (4) обуславливают граничные эффекты, в т. ч. и отрыв последних кластеров.

Для изучения влияния ангармоничности потенциала на процесс пыления выберем в качестве сил взаимодействия кластеров $f(x)$ силы, соответствующие потенциалу Морзе:

$$f_M(x) = 2\alpha D \left[e^{-\alpha(x-a)} - e^{-2\alpha(x-a)} \right] \quad (5)$$

и гармоническому потенциалу

$$f_G(x) = 2\alpha^2 D(x-a). \quad (6)$$

Обе силы согласованы друг с другом по нулевой скорости звука: $c_0 = \alpha a \sqrt{2D/m}$.

Решение уравнений движения (3) и (4) было реализовано в рамках комплексов Mathcad и MATLAB при помощи метода Рунге – Кутты четвертого порядка точности. Для проведения расчетов использовались значения $I = 100$ и $a = 10^{-5}$ м. Параметры потенциала соответствовали кластерам алюминия: $\alpha = 3,76 \cdot 10^5 \text{ м}^{-1}$, $D = 2,46 \cdot 10^{-6}$ Дж, $c_0 = 5454 \text{ м/с}$, $m = 2,338 \cdot 10^{-12}$ кг.

Радиус отсечки был выбран $R_c = 1,2$. Первому кластеру на левой границе цепочки навязывалась скорость движения u , что инициировало ударную волну.

На рис. 3 и 4 показана динамика изменения скоростей и координат приграничных кластеров со временем при скорости нагружения $u = 4000 \text{ м/с}$, полученная из расчетов для сил взаимодействия между частицами, соответствующих потенциалу Морзе (5) и гармоническому потенциалу (6). Нумерация частиц идет от правой границы.

Видно, что за счет ангармоничности потенциала Морзе происходит отрыв всех десяти поверхно-

стных кластеров (возможно и более), а для гармонического потенциала отрывается всего два кластера, связь между которыми сохраняется (они колеблются относительно общего центра тяжести). Разогрев в ударной волне с массовой скоростью $u = 4000 \text{ км/с}$ составляет 8 МДж/кг , что близко к теплоте испарения алюминия 11 МДж/кг . По этой причине пыление с поверхности в данном случае может иметь физическую природу, а не рассматриваться только как побочный эффект.

Отметим, что в данной программе существуют широкие возможности для подробного вывода и анализа всех физических величин, характеризующих движение кластеров, что делает ее хорошим методическим инструментом. Например, можно исследовать влияние дальнедействующего потенциала взаимодействия кластеров на процесс пыления (см. раздел 4), а также использовать предложенную модель для поиска подходов, устраняющих счетные эффекты пыления.

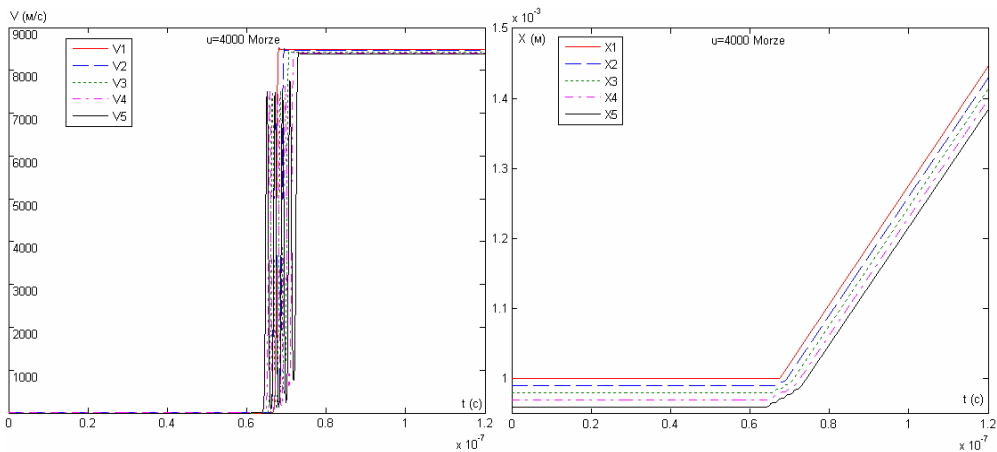


Рис. 3. Динамика изменения координат и скоростей приграничных кластеров со временем при скорости нагружения $u = 4000 \text{ м/с}$ для потенциала Морзе

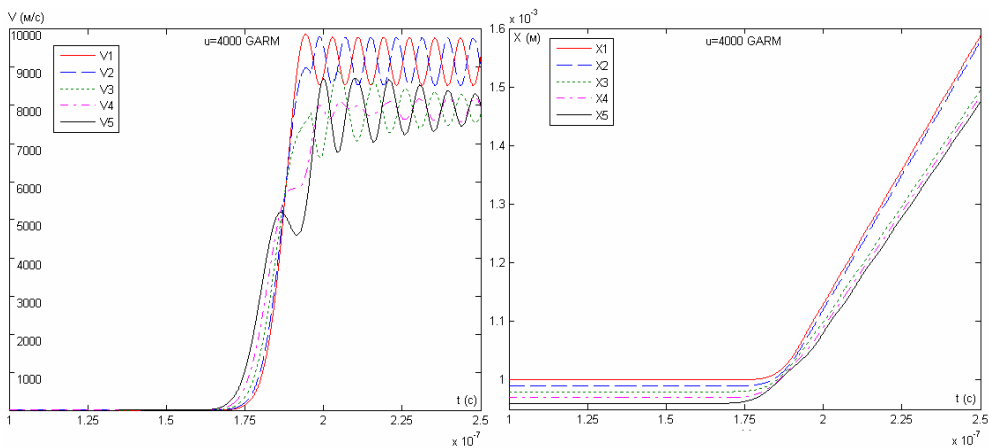


Рис. 4. Динамика изменения координат и скоростей приграничных кластеров со временем при скорости нагружения $u = 4000 \text{ м/с}$ для гармонического потенциала

3. Критерий возникновения процесса пыления

Для оценки пороговой скорости нагружения u_{cr} , при которой начинается пыление в трехмерных расчетах (раздел 1), рассмотрим одномерную цепочку частиц, описываемую уравнениями (3) с гармоническим потенциалом взаимодействия (6). Частоты колебаний $\omega(k)$ в такой цепочке подчиняются следующему закону дисперсии [13]:

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \sin \frac{ka}{2}, \text{ где } k = \frac{2\pi}{a} \frac{n}{I+1}, \quad (7)$$

β – коэффициент жесткости. Малые частоты ω и волновые векторы k отвечают за движение системы как целого. В длинноволновом приближении $\omega = kc_0$, где c_0 – скорость звука. Максимальная частота колебаний кластеров в цепочке $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/m}$, ей отвечает минимальный период $T_{\min 0} = \pi\sqrt{m/\beta} = \pi a/c_0$.

Рассмотрим подробнее колебания кластеров, находящихся на конце цепочки, используя одномерную модель, описанную выше (см. раздел 2). Расчеты велись для сил взаимодействия между частицами, соответствующих потенциалу Морзе (5) и гармоническому потенциалу (6).

Результаты расчетов с гармоническим потенциалом взаимодействия кластеров показывают следующее:

- Период колебаний приграничных кластеров T_G при выходе УВ на свободную поверхность не зависит от амплитуды УВ (скорости нагружения). Наблюдается практически полное подобие в поведении скоростей частиц (меняется только их амплитуда) для различных скоростей нагружения u .

- Характерный период колебаний составляет $T_G = 1,2 \cdot 10^{-8}$ с, что примерно в два раза больше минимального периода колебаний кластеров в цепочке $T_{\min} = \pi a/c_0 = 5,76 \cdot 10^{-9}$ с.

Относительные скорости движения соседних кластеров невелики (их амплитуда примерно $w \approx u/4$). Соседи движутся софазно, что и сохраняет целостность цепочки.

Для подтверждения этой картины на рис. 5,а показано поведение относительных скоростей движения соседних кластеров на конце цепочки для скорости нагружения $u = 2$ км/с. Видно, что амплитуды относительных скоростей $w \approx 500$ м/с невелики по сравнению со скоростью нагружения.

Рассмотрим теперь основные особенности колебательного движения кластеров, находящихся на конце цепочки, для потенциала Морзе. За счет ангармоничности этого потенциала появляются более высокие частоты колебаний кластеров. Для небольшой скорости нагружения $u = 50$ м/с поведение скоростей приграничных кластеров почти совпадает с поведением для гармонического потенциала, однако период колебаний немного меньше $T_M = 1,1 \cdot 10^{-8}$ с. С увеличением скорости нагружения период колебаний кластеров уменьшается: для $u = 2$ км/с он составляет $T_M = 3 \cdot 10^{-9}$ с, а для $u = 10$ км/с приближается к значению $T_M = 10^{-9}$ с.

Поведение относительных скоростей движения соседних кластеров на конце цепочки для потенциала взаимодействия Морзе при скорости нагружения $u = 2$ км/с приведено на рис. 5,б. Видно, что появляются колебания с движением соседних частиц в противофазе, которые наиболее эффективны для разрыва связей между ними. При этом относительные скорости гораздо больше, чем для гармонического потенциала, для их амплитуды с хорошей точностью выполняется оценка $w \approx 2u$.

Появление высокочастотных мод колебаний кластеров с уменьшающимся периодом можно объяснить, учитывая зависимость скорости звука от амплитуды нагружения u . Отметим, что данное явление отсутствует для гармонического потенциала, где скорость звука постоянна и не зависит от скорости нагружения.

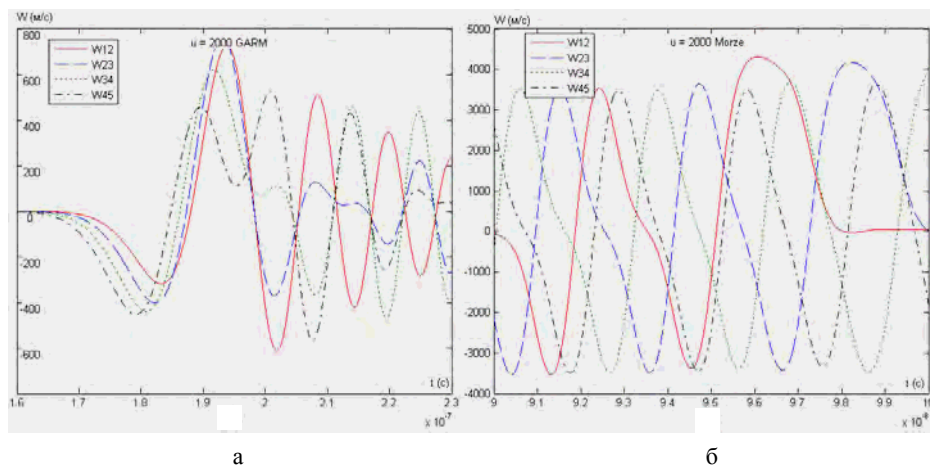


Рис. 5. Поведение относительных скоростей соседних кластеров на конце цепочки для гармонического потенциала взаимодействия (а) и потенциала Морзе (б) при скорости нагружения $u = 2$ км/с

Определить зависимость скорости звука от скорости нагружения $c(u)$ можно следующим образом: для потенциала Морзе коэффициент жесткости β зависит от среднего относительного сжатия $y = \bar{x}/a$

$$\beta(y) = \beta(1) \left(2e^{-2\alpha a(y-1)} - e^{-\alpha a(y-1)} \right); \quad \beta(1) = 2\alpha^2 D.$$

Поскольку скорость звука $c(y) = c_0 \sqrt{\beta(y)/\beta(1)}$, а среднее относительное сжатие из геометрических соображений $y(u) = [c(u) - u]/c(u)$, то для $y(u)$ получаем уравнение

$$y + \frac{u}{c_0 \sqrt{2e^{-2\alpha a(y-1)} - e^{-\alpha a(y-1)}}} - 1 = 0, \quad (8)$$

решая которое при различных u можно найти зависимость $c(u)$ и минимальный период колебаний $T_{\min}(u) = \pi a/c(u)$ с учетом ангармоничности.

Результаты для некоторых скоростей нагружения представлены в табл. 1. В последней строке указаны оценочные значения периодов колебаний кластеров, находящихся на конце цепочки, полученные в расчетах по одномерной модели для потенциала Морзе.

В целом, по результатам расчетов с ангармоническим потенциалом взаимодействия можно констатировать следующее:

- Для рассматриваемых скоростей нагружения необходим учет зависимости скорости звука и периода колебаний кластеров от массовой скорости за фронтом УВ – u .
- Период колебаний кластеров T_M при выходе УВ на свободную поверхность приближается к минимальному значению $T_{\min}(u) = \pi a/c(u)$, и возникают колебания с движением соседей в противофазе, которые наиболее эффективны для разрыва связей. Тем самым, с ростом u происходит все более интенсивная генерация самой высокочастотной моды.
- Относительные скорости движения соседних кластеров велики, и их амплитуды с хорошей точностью оцениваются величиной $w \approx 2u$.

Отметим, что влияние ангармоничности на колебания цепочки связанных кластеров впервые, пожалуй, было отмечено в работе Ферми – Паста – Уллама [14].

Судя по картине пыления, полученной в разделах 1 и 2, процесс диспергирования происходит в течение некоторого промежутка времени с последовательным отрывом приграничных кластеров, но суммарное количество сброшенных кластеров (слов) может быть значительно больше единицы. Однако для выработки критерия пыления достаточно рассмотреть процесс отрыва крайнего кластера.

Кинетическая энергия относительного движения соседних кластеров оценивается величиной $E_k = mw^2 = 4mu^2$. Потенциал вблизи минимума $V(x) = \beta(x-a)^2/2 - V(a)$, где коэффициент жесткости $\beta = c_0^2/a^2$. Энергия связи на расстоянии отсечки x_c примерно равна $E_c = m\beta a^2 (x_c/a - 1)^2/2 = mc_0^2 (R_c - 1)^2/2$, где $R_c = x_c/a$ – безразмерный радиус отсечки. Критерием пыления в одномерной цепочке можно считать условие $E_k > E_c$, т. е. $u/c_0 > (R_c - 1)/2\sqrt{2}$. На самом деле, в этой оценке не учтена трехмерная структура нагружаемого материала и приближенная оценка, относящаяся к отрыву единичного кластера (слоя). Сравнение с результатами трехмерных расчетов позволяет предложить следующий полуэмпирический критерий для начала пыления в расчетах по методу КД при выходе УВ на свободную границу:

$$u/c_0 > 1,35(R_c - 1). \quad (9)$$

В табл. 2 приведены значения пороговых скоростей пыления u_{cr} для различных радиусов отсечки, полученные из результатов трехмерных расчетов, и пороговые скорости $u_{cr calc}$, оцененные по критерию (9). Видно, что предложенный критерий хорошо согласуется с данными трехмерных расчетов.

Таблица 1

Зависимость характерных величин от скорости нагружения u

u , м/с	0	50	500	1000	2000	4000	10000
$c(u)/c_0$	1	1,050	1,409	1,721	2,238	3,084	5,099
$c(u)$, км/с	5,454	5,727	7,685	9,389	12,20	16,82	27,81
$T_{\min}(u)$, 10^{-9} с	5,76	5,49	4,09	3,35	2,57	1,87	1,13
T_M , 10^{-9} с	–	11	5,5	4,5	3	1,9	1

Таблица 2

Пороговые скорости пыления для алюминия

R_c	1,05	1,1	1,2	1,3
u_{cr} , км/с	0,4	0,6	1,4	2,5
$u_{cr calc}$, км/с	0,37	0,74	1,47	2,21

4. Модель и расчеты для дальнедействующего потенциала

Рассмотрим, как влияет на побочные эффекты пыления введение дальнедействующего потенциала взаимодействия кластеров. По физическому смыслу это должно сглаживать высокочастотные моды колебаний решетки, и, следовательно, уменьшать их амплитуды. Предположим, что с i -м кластером взаимодействуют N соседей с каждой стороны, причем силы взаимодействия зависят от относительного расстояния, тогда уравнение его движения имеет вид

$$m\ddot{x}_i = \sum_{n=1}^N \frac{f_M [(x_{i+n} - x_i)/n]}{n} - \sum_{n=1}^N \frac{f_M [(x_i - x_{i-n})/n]}{n}. \quad (10)$$

Условие отсечки для i -го соседа следующее: $f(x) = 0$ при $x > iR_c a$, как и должно быть по физическому смыслу – связь рвется при относительном растяжении R_c .

Отметим, что введение такого дальнедействующего потенциала взаимодействия кластеров аналогично другому методу частиц – перидинамике [9, 10]. На рис. 6 изображена динамика изменения скоростей и координат приграничных кластеров со временем при скорости нагружения $u = 2000$ м/с. Число взаимодействующих соседей $N = 5$. Из этого рисунка видно, что процесс диспергирования кластеров хоть и уменьшился, но не устранен полностью. Дальнейшие исследования показали, что увеличение числа взаимодействующих соседей не решает проблему устранения счетных эффектов пыления.

5. Устранение побочного пыления путем модификации уравнений движения кластеров

Исследуем способы устранения побочных эффектов пыления путем модификации уравнений движения сначала на одномерной модели, в которой образец представляет собой цепочку кластеров, нагружаемую с левой границы (см. раздел 2). Как мы

видели, одной из основных причин диспергирования в цепочке кластеров служит появление больших относительных скоростей между частицами, обусловленное ангармоничностью потенциала взаимодействия.

Введем в уравнения движения кластеров (3) силы торможения, пропорциональные относительным скоростям соседних частиц

$$\frac{dx_i}{dt} = v_i; \quad \ddot{x}_i = \frac{1}{m} [f(x_{i+1} - x_i) - f(x_i - x_{i-1})] - \Gamma(v_i - v_{i+1}) - \Gamma(v_i - v_{i-1}), \quad (11)$$

где v_i – скорость i -го кластера и $\Gamma = c_0/Ja$ – постоянная торможения, имеющая размерность обратного времени, $J = 10 \div 100$ – эмпирическое число, характеризующее моды колебаний кластеров, которые нужно подавить, чтобы устранить побочные эффекты пыления. Номинально будут полагаться $\Gamma = c_0/50a$.

Важно, что модифицированные уравнения движения (11) обеспечивают компенсацию дополнительных сил при их сложении вдоль цепочки.

На рис. 7 показаны координаты и скорости приграничных кластеров для $u = 2000$ м/с и потенциала Морзе с радиусом отсечки $R_c = 1,2$, полученные в расчетах с уравнениями движения (11). Показаны также координаты и скорости посередине слоя кластеров XSS и VSS, которые иллюстрируют коллективные упругие колебания внутри цепочки. Видно, что побочное пыление устранено полностью, при этом закон удвоения скоростей на разгрузке соблюдается с хорошей точностью.

На рис. 8 показан баланс энергии в системе кластеров. На первоначальном участке идет отбор энергии от левой границы, движущейся с постоянной скоростью. После прихода волны разгрузки на правую границу начинается свободный полет цепочки (образца) с незначительным перераспределением между кинетической и потенциальной энергией за счет внутренних колебаний образца.

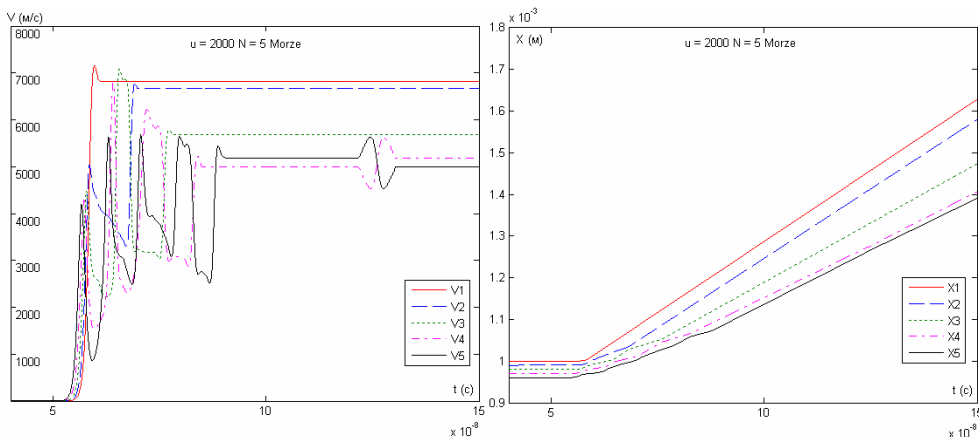
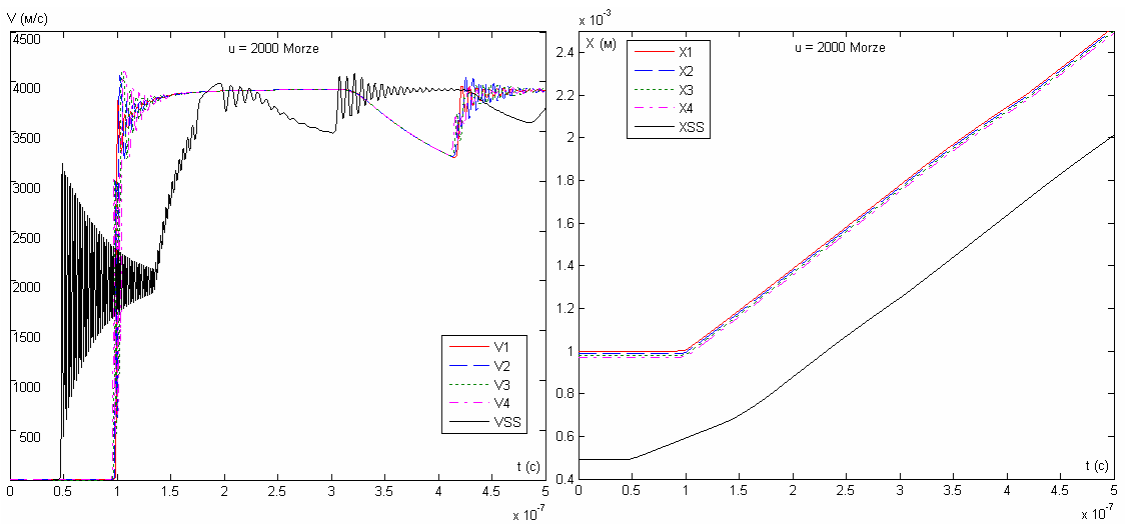


Рис. 6. Динамика изменения координат и скоростей приграничных кластеров при скорости нагружения $u = 2000$ м/с для дальнедействующего потенциала с $N = 5$



Рису. 7. Динамика изменения координат и скоростей приграничных кластеров для потенциала Морзе и скорости нагружения $u = 2000$ м/с при использовании уравнений (11)

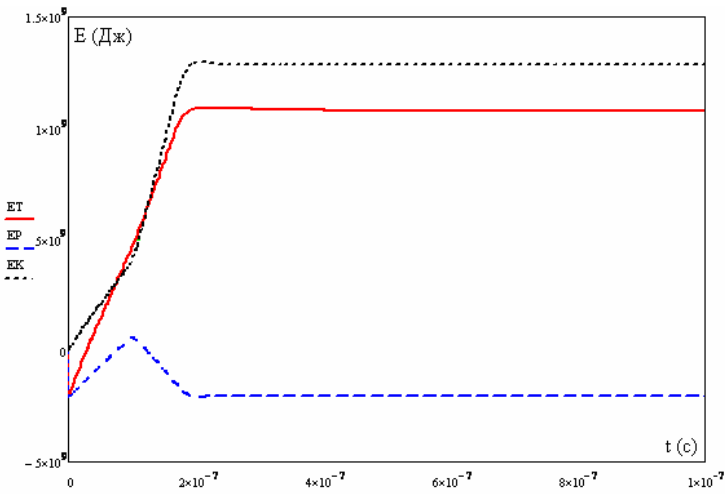


Рис. 8. Поведение полной ET, кинетической EK и потенциальной энергии EP образца со временем в расчетах с уравнением движения (11)

Видно, что баланс полной энергии соблюдается с большой точностью. Таким образом, предлагаемый подход (11) полностью устраняет побочные эффекты пыления и сохраняет основные физические закономерности процесса нагружения и дальнейшего движения одномерной цепочки кластеров.

В общем трехмерном случае модифицированные уравнения движения, устраняющие побочное пыление, имеют вид

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i; \quad \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{1}{m} \sum_{\vec{r}_k \in \Omega_i} \vec{f}(\vec{r}_k - \vec{r}_i) - \Gamma \sum_{\vec{r}_k \in \Omega_i} (\vec{v}_i - \vec{v}_k). \quad (12)$$

Здесь суммирование ведется по соседям, находящимся в объеме Ω_i (в радиусе действия потенциала). Важно, что добавление таких взаимно компенсирующихся сил не меняет баланс энергии-импульса и не приводит к диссипации интегральных величин.

6. Результаты трехмерных расчетов с модифицированными уравнениями движения

Чтобы определить эффективность применения модифицированных уравнений движения кластеров (12) для устранения счетных эффектов пыления в реальных задачах, выполнена серия трехмерных расчетов о движении плоской УВ в алюминиевом образце (рис. 1). Постановка расчетов описана в разделе 1. Скорость нагружения на левой границе 2 км/с, радиус отсечки потенциала 1,1 (в этом случае счетные эффекты пыления были выражены очень хорошо).

Для того чтобы количественно охарактеризовать процесс диспергирования с правой границы, рассчитывалось распределение числа кластеров N по длине образца X . На рис. 9 показано сравнение распределений числа частиц в слое в расчетах без торможения (сплошная линия) и с торможением $\Gamma = c_0/50a$

(пунктирная кривая) на момент времени 1,5 мкс. Видно, что диспергирование снимается полностью.

Сравнение поведения других величин: плотности, скорости и давления, полученных в расчетах без торможения и с торможением $\Gamma = c_0/50a$, показывает, что модификация уравнений движения кластеров (12) практически не меняет основные физические закономерности процесса нагружения и дальнейшего движения образца. Таким образом, предлагаемый подход позволяет устранить побочные эффекты пыления и при этом незначительно меняет динамику движения волн в системе.

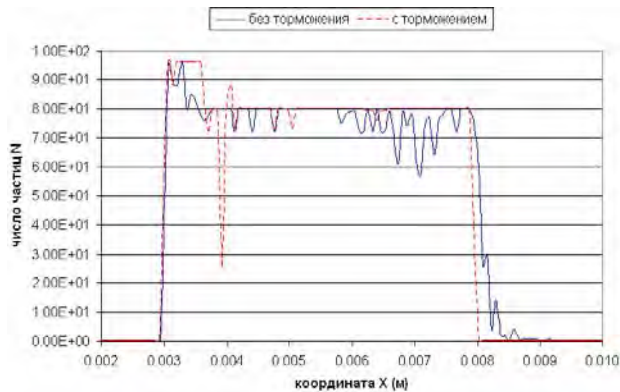


Рис. 9. Распределение числа кластеров по координате в расчетах без торможения (непрерывная линия) и с торможением $\Gamma = c_0/50a$ (пунктирная кривая) на момент времени 1,5 мкс

Заключение

В работе представлены результаты моделирования методом КД процесса пыления при выходе плоской УВ на свободную гладкую поверхность однородного материала. Из результатов расчетов с различными массовыми скоростями за фронтом волны следует, что процесс диспергирования нерегулярен и носит пороговый характер. При этом число кластеров пыли ведет себя немонотонно с увеличением массовой скорости за фронтом волны u , а при достаточно сильных УВ значительно превышает оценки для единичного слоя кластеров. Это находится в противоречии с результатами, полученными для гармонического потенциала, где процесс пыления либо совсем отсутствует, либо содержит небольшое число кластеров. Таким образом, пыление с гладкой поверхности однородного материала после выхода плоской УВ в методе КД обусловлено ангармоничностью потенциала взаимодействия кластеров и является побочным счетным эффектом.

Масса вещества, диспергированного с единицы площади, убывает обратно пропорционально размеру кластера и побочные эффекты пыления при этом снижаются, но реальное устранение эффекта пыления происходит лишь для субмикронных кластеров.

Методические вопросы по движению кластеров при распространении возмущений, в т. ч. вызванных движением границы и ангармоничностью потенциала, исследованы на одномерной модели. Расчеты выполнены для задачи о прохождении УВ по цепочке и ее выходу на свободную границу, при этом особое внимание обращено на поведение приграничных кластеров, обусловленное этими процессами.

Сравнение результатов методических расчетов показывает, что в случае гармонического потенциала взаимодействия повышение скорости нагружения и практически не меняет частоту колебаний приграничных кластеров, а относительные скорости соседних кластеров остаются небольшими. В то же время для потенциала Морзе (и любого другого ангармонического потенциала) увеличение u приводит к повышению характерных частот колебаний, за счет чего возникают колебания с движением соседних кластеров в противофазе, которые наиболее эффективны для разрыва связей между ними. При этом относительные скорости движения соседей имеют большую амплитуду, которая с хорошей точностью оценивается величиной $w \approx 2u$. Исходя из картины колебаний в одномерной цепочке кластеров, выработаны критерии, который позволил (с точностью до эмпирического множителя) определить пороговую скорость u_{cr} для различных радиусов отсечки в реальных трехмерных задачах.

Исследованы особенности пыления для короткодействующих и далекодействующих потенциалов. Введение далекодействующих потенциалов явно уменьшает диспергирование, но оно не снимается полностью. Вполне возможно, что пыление на уровне нескольких кластеров (слоев) имеет физический смысл при больших скоростях нагружения (особенно при нагоне тепловой энергии в УВ на уровне теплоты испарения материала [11]).

Наиболее эффективным способом уничтожения счетных эффектов пыления является модификация уравнений движения кластеров путем добавки сил торможения, пропорциональных относительным скоростям частиц. Методические расчеты показывают, что предложенный в отчете выбор сил торможения полностью устраняет побочные эффекты пыления и сохраняет основные физические закономерности процесса нагружения и дальнейшего движения образца. Эффективность предложенного подхода проверена в серии трехмерных расчетов. Показано, что торможение сглаживает высокочастотные колебания кластеров, приводящие к счетным эффектам пыления, и мало меняет динамику движения волн в системе. Предложенный подход может использоваться в дальнейшем, как при решении практических задач, так и для отделения физических эффектов от счетных, например, при исследовании процессов пыления при выходе УВ на свободную границу поликристаллического образца.

Литература

1. Пискунов В. Н., Давыдов И. А. Метод кластерной динамики и его применение в задачах импульсного нагружения твердых тел // Деформация и разрушение материалов. 2008. № 1. С. 3–9.
2. Davydov I. A., Piskunov V. N., Veselov R. A. et al. Cluster dynamics method for simulation of dynamic processes of continuum mechanics // Computational Materials Science. 2010. Vol. 49. S32-S36.
3. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
4. Alder B. J., Wainwright T. E. Studies in Molecular Dynamics. I. General Method // J. Chem. Phys. 1957. V. 27. P. 1208.
5. Holian B. L., Ravelo R. Fracture simulations using large-scale molecular dynamics // Phys. Rev. 1995. V. B51. N 17. P. 11275.
6. Попов В. Л., Псахье С. Г. Теоретические основы моделирования упругопластических сред методом подвижных клеточных автоматов. I. Однородные среды // Физ. мезомех. 2001. Т. 4, № 1. С. 17–28.
7. Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН. 2002, Т. 3, № 2. С. 254.
8. Кривцов А. М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // ФТТ. 2004. Т. 46. Вып. 6. С. 1025.
9. Silling S. A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces // J. Mech. Phys. Sol. 2000. V. 48, N 1. P. 175.
10. Silling S. A., Askari E. A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics. Computers and Structures. 2005. V. 83. P. 1526.
11. Забабахин Е. И. Некоторые вопросы газодинамики взрыва. Снежинск, 1997.
12. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных явлений. М.: Наука, 1966.
13. Рабинович М. И., Трубецков Д. И. Введение в теорию колебаний и волн. НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2000.
14. Fermi E., Pasta J., Ulam S. Studies of Nonlinear Problems. Document LA-1940 (May 1955).