3 Анализ дефектности поверхностного слоя материала на основе триботехнических испытаний. 3D-моделирование

3.1 Особенности взаимодействия подвижных автоматов при 3D-моделировании

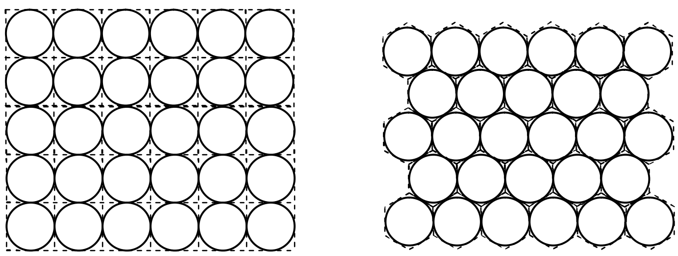
В первом разделе метод подвижных клеточных автоматов изложен в основном в приложении к двумерным задачам. Трехмерная реализация метода требует конкретизации общих положений и расширения некоторых понятий.

Начнем с формы и размеров подвижных клеточных автоматов. В рамках используемого приближения каждый автомат i характеризуется одним размерным параметром d_i, следовательно автоматы не имеют определенной формы. Размер автоматов определяется условиями конкретной задачи. Поскольку автоматы представляют элементы среды, в общем случае гетерогенной, то они могут рассматриваться, например, как отдельные зерна поликристалла, частицы порошковой смеси и т.д. Для адекватного описания конкретного материала очень важно правильно выбрать необходимый размер автоматов. В общем случае размеры автоматов могут быть различными даже при моделировании одного тела. Но, как показывает практика двумерных расчетов, использование одинаковых по размеру автоматов представляется более удобным. Такой выбор согласуется и с основной идеей классических клеточных автоматов, где сетка является регулярной и однородной. Стоит напомнить, что шаг интегрирования по времени, с физической точки зрения, также связан с размером дискретности модели, поэтому использование одинакового размера всех автоматов моделируемой системы, с точки зрения численной схемы интегрирования уравнений движения, также представляется более оправданным. И, наконец, с точки зрения программной реализации метода, особенно в трехмерной версии, использование одного размера автомата для всей системы дает основание для написания более простого и оптимального программного кода.

При задании начального состояния системы весь моделируемый объект заполняется клеточными автоматами. Поскольку все автоматы имеют одинаковый размер, то они образуют регулярную упаковку. В этом случае удобно представлять автоматы в виде шаров. Однако для определения начального объема автоматов такое представление будет неверным, так как оно приводит к дефекту общего объема из-за пустот между шарами. Таким образом, эффективная форма автоматов, используемая для вычисления объема, зависит от вида упаковки. Зная объем и плотность материала можно вычислить две другие характеристики автомата: массу m_i и тензор момента инерции $\hat{J}_i$. Упаковкой также определяются еще два важных параметра: площадь контакта S_{ij} пары автоматов ij и количество соседей (координационное число) N.

Рассмотрим возможные упаковки автоматов для задач различной размерности.

В одномерных задачах возможна только линейная цепочка шаров. В этом случае d_i – расстояние между центрами автоматов. Количество соседей равно двум, а в качестве эффективной формы естественно взять куб со стороной d_i. Тогда начальный объем определится как $\Omega_i^0 = d_i^3$, а площадь контакта – $S_{ij} = d_i^2$.

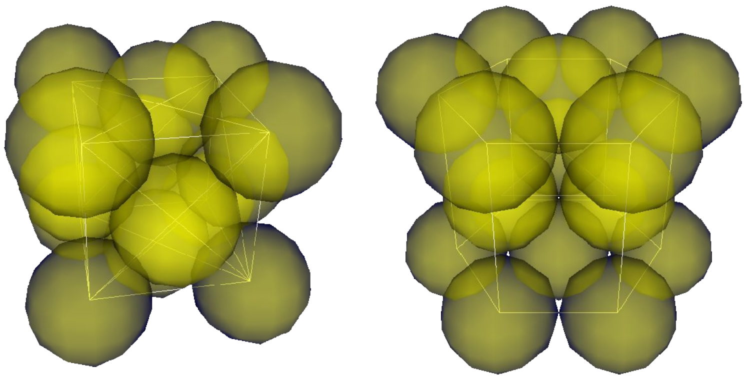


а) б)

Рисунок 3.1 – Квадратная (*а*) и плотная (*б*) упаковки автоматов на плоскости

В двумерном случае упаковка может быть либо квадратной, либо гексагональной (плотноупакованной). Обе упаковки показаны на рис. 3.1. Для квадратной упаковки количество соседей равно четырем, формой автомата также является куб со стороной d_i. Начальный объем $\Omega_i^0 = d_i^3$, а площадь контакта $S_{ij} = d_i^2$. Для гексагональной упаковки количество соседей равно шести, формой автомата является призма высотой d_i с основанием в виде правильного шестиугольника со стороной $d_i / \sqrt{3}$. Начальный объем равен $\Omega_i^0 = d_i^3 \sqrt{3}/2$, а площадь контакта $S_{ij} = d_i^2 / \sqrt{3}$.

В трехмерном случае упаковка может быть либо кубической, либо плотноупакованной. Для кубической упаковки количество соседей равно шести, формой является куб со стороной d_i, начальный объем $\Omega_i^0 = d_i^3$, а площадь контакта $S_{ij} = d_i^2$.



а) б)

Рисунок 3.2 – Гранецентрированная кубическая (а) и гексагональная (б) плотные упаковки в трехмерном пространстве

Плотная упаковка в трехмерном пространстве в свою очередь может быть гранецентрированной кубической или гексагональной (рис. 3.2). Количество соседей в обоих случаях равно двенадцати. Для гранецентрированной кубической упаковки формой автомата является ромбододекаэдр (рис. 3.3), ромбические грани которого имеют большую диагональ равную d_i, а малую – $d_i / \sqrt{2}$. Начальный объем такого автомата $\Omega_i^0 = d_i^3 / \sqrt{2}$, а площадь контакта $S_{ij} = d_i^2 / (2\sqrt{2})$. В случае гексагональной плотной упаковки форма автомата не является правильным многогранником – часть граней остаются ромбами, а другие грани являются трапециями. При этом площади контакта и объем автомата остаются теми же, как и в случае гранецентрированной кубической упаковки.

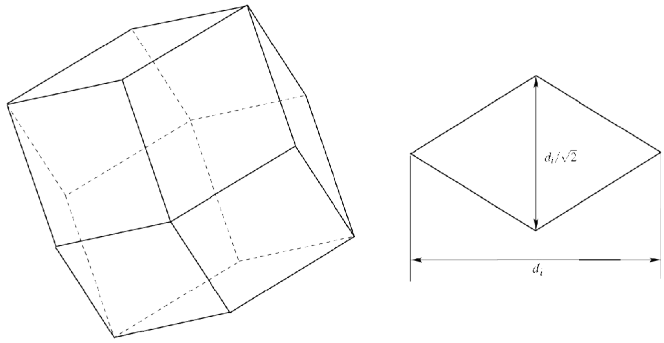


Рисунок 3.3 – Форма автомата и его грань в случае гранецентрированной кубической упаковки

Масса автомата определяется через начальный объем Ω_i^0 и плотность вещества автомата ρ_i по формуле $m_i = \Omega_i^0 \rho_i$.

При вычислении тензора момента инерции для простоты полагаем автомат симметрическим волчком в двумерном случае и шаровым волчком в трехмерном. Тогда тензор инерции является шаровым с главными моментами равными $\hat{J}_i = 0{,}5\ m_i R_i^2$ в двумерном случае и $\hat{J}_i = 0{,}4\ m_i R_i^2$ в трехмерном случае. Эффективный радиус автомата R_i вычисляется из равенства объема автомата объему эффективного цилиндра в двумерном случае:

$$\pi R_i^2 d_i = \Omega_i^0,\ R_i = \sqrt{\Omega_i^0 / \pi d_i}$$

и объему эффективного шара в трехмерном:

$$4/3\pi R_i^3 = \Omega_i^0,\ R_i = \sqrt[3]{3\Omega_i^0 / 4\pi}\ .$$

Все характеристики автоматов для различных упаковок и размерностей задачи приведены в таблице 3.1.

Таблица 3.1. Характеристики автоматов для различных упаковок

Размер-ность	Упаковка	Коорд. число	Форма	Объем	Площадь контакта	NdS/Ω
D		N		Ω	S	
1	цепочка	2	куб	d^3	d^2	$2\equiv 2D$
2	квадратная	4	куб	d^3	d^2	$4\equiv 2D$
	плотная	6	6-гранная призма	$d^3\sqrt{3}/2$	$d^2/\sqrt{3}$	$4\equiv 2D$
3	кубическая	6	куб	d^3	d^2	$6\equiv 2D$
	плотная	12	ромбододекаэдр	$d^3/\sqrt{2}$	$d^2/(2\sqrt{2})$	$6\equiv 2D$

Итак, в рамках метода подвижных клеточных автоматов механическое состояние моделируемой системы характеризуется следующими величинами: радиус-векторами центров автоматов $\{\vec{r}_i\}$, поступательными скоростями автоматов $\{\vec{\upsilon}_i\}$, углами их поворота $\{\vec{\theta}_i\}$ и угловыми скоростями $\{\vec{\omega}_i\}$. Механическое взаимодействие между двумя произвольными автоматами i и j определяется их свойствами, параметрами состояния и в парном приближении описывается силой $\vec{F}_{ij}$ со стороны i-го автомата на j-ый и силой $\vec{F}_{ji}$ ($\vec{F}_{ji} = -\vec{F}_{ij}$), с которой j-ый автомат действует на i-ый. В общем виде выражение для этой силы можно записать как:

$$\vec{F}_{ij} = (\vec{p}_{ij} + \vec{f}_{ij}),$$

где $\vec{p}_{ij}$ описывает центральное парное взаимодействие, а $\vec{f}_{ij}$ – тангенциальная составляющая парной силы взаимодействия двух клеточных автоматов. Тип состояния пары (*связанные* или *несвязанные*) определяет какие конкретно силы действуют между автоматами.

Механическая эволюция ансамбля клеточных автоматов определяется решением системы уравнений движения, записанных с учетом многочастичности взаимодействия:

$$\begin{cases} m_i \dfrac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i^{\Omega} + \sum\limits_j \vec{F}_{ij}, \\ \hat{J}_i \dfrac{d^2\vec{\theta}_i}{dt^2} = \sum\limits_j \vec{K}_{ij}, \end{cases}$$

где $\vec{F}_i^{\Omega}$ – объемно-зависящая сила, действующая на автомат i со стороны всех его соседей и обусловленная их взаимодействием с другими автоматами, $\vec{K}_{ij} = q_{ij}(\vec{n}_{ij} \times \vec{f}_{ij})$, q_{ij}– расстояние от центра i-го автомата до точки его контакта с j-м автоматом, единичный вектор ориентации пары $\vec{n}_{ij}$ определяется как $\vec{n}_{ij} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i)/r_{ij}$, r_{ij} – расстояние между центрами автоматов.

Парная сила центрального взаимодействия действует вдоль линии, проходящей через центры автоматов. Будем характеризовать ее скалярной удельной величиной (напряжением) p_{ij}, равномерно распределенной по площади контакта S_{ij}:

$$\vec{p}_{ij} = p_{ij} S_{ij} \vec{n}_{ij}$$

Сила парного центрального взаимодействия автоматов разделяется на две составляющих: упруго-пластическую p^e_{ij} и вязкую p^v_{ij}. Упруго-пластическая составляющая отражает свойство материала сопротивляться при его формоизменении и определяется степенью деформации автоматов, а вязкая – характеризует диссипативные свойства материала и определяется скоростью относительного движения автоматов.

Сначала рассмотрим упруго-пластическую составляющую центрального взаимодействия (притяжение–отталкивание). При центральном взаимодействии пары автоматов i и j будет меняться расстояние q_{ij} от центра автомата i до точки его контакта с автоматом j и соответствующее расстояние q_{ji}. Следовательно, результирующую линейную деформацию автомата i можно характеризовать величиной

$$\xi_{ij} = \frac{q_{ij} - d_i/2}{d_i/2},$$

где d_i – размер автомата. Подчеркнем, что парные силы определяют сопротивление формоизменению автоматов, а объемно зависящие – изменению локальной плотности. Чтобы получить составляющую, отвечающую за формоизменение, из величины ξ_{ij} необходимо вычесть среднюю по всем соседям

$$\bar{\xi}_i = \frac{\sum_{k=0}^{N} \xi_{ik}}{N},$$

где N – координационное число упаковки (количество соседей автомата).

Когда деформации малы, можно ограничиться линейным приближением (законом Гука), и записать удельную силу сопротивления формоизменению [120] как:

$$p_{ij}^{e} = -2G(\xi_{ij} - \bar{\xi}_i),$$

где G – модуль сдвига.

В общем случае зависимость $p_{ij}^{e}(\xi_{ij} - \bar{\xi}_i)$ определяется функцией отклика материала, из которого составлен автомат (рис. 1.6).

Поскольку в общем трехмерном случае нет смысла использовать приближения малости тех или иных компонент тензора напряжений, а также в силу важности нелинейной зависимости давления от объемной деформации при высокоскоростном нагружении, в трехмерной версии метода подвижных клеточных автоматов удобнее пользоваться подходом «погруженной частицы» при вычислении многочастичного центрального взаимодействия. В этом случае отклик на изменение объема определяется объемно-зависящей силой F_i^{Ω}, действующей на автомат i и обусловленной давлением со стороны окружения. Ее выражение может быть записано в рамках модели «погруженной частицы» как

$$\vec{F}_i^{\Omega} = -\sum_j P_j S_{ij} \vec{n}_{ij},$$

где индекс j (j=1…N) нумерует автоматы, взаимодействующие с автоматом i, P_j – давление j-го соседнего автомата, S_{ij} – площадь контакта i-го автомата с j-м. Давление автомата определяется изменением его объема:

$$P_j = -K_j \frac{\Omega_j - \Omega_j^0}{\Omega_j^0},$$

где Ω_j^0 – начальный равновесный объем автомата, Ω_j – текущий объем автомата, K_j – модуль всестороннего сжатия материала этого автомата, который в общем случае может корректироваться в соответствии с нелинейным уравнением состояния. Изменение объема автомата в простейшем приближении можно определить исходя из изменений расстояний от центра этого автомата до точек его контакта с соседями Δq_{ij} из соотношения

$$\frac{\Omega_j-\Omega_j^0}{\Omega_j^0}=\frac{\sum\limits_{k=0}^{N}\Delta q_{jk}S_{ij}}{\Omega_j^0}=D\frac{\sum\limits_{k=0}^{N}\xi_{jk}}{N}=D\bar{\xi}_i,$$

где D – размерность задачи (1,2,3). Данное соотношение легко получить, воспользовавшись таблицей 3.1.

Как и в случае центрального взаимодействия, силу тангенциального взаимодействия будем характеризовать ее скалярной удельной величиной (напряжением) f_{ij}, равномерно распределенной по площади контакта S_{ij}. В данном подходе тангенциальная сила парного взаимодействия автоматов разделяется на три составляющих: упруго-пластическое сопротивление сдвиговой деформации f_{ij}^{e}, сила вязкого трения f_{ij}^{v} и сила сухого трения f_{ij}^{dr}. Упруго-пластическая составляющая отражает свойство материала сопротивляться при его сдвиговом деформировании и определяется степенью сдвиговой деформации автоматов. Вязкое трение характеризует диссипативные свойства материала и определяется скоростью относительного движения контактирующих точек автоматов. Сила сухого трения действует только в случае, если взаимодействующие автоматы принадлежат различным телам.

Сначала рассмотрим силу сопротивления сдвиговой деформации, которая действует только в случае взаимодействия связанных (*linked*) автоматов. Для этого определим величину, характеризующую степень сдвиговой деформации пары двух произвольных связанных автоматов i и j.

Как известно [146], при вращении абсолютно твердого (недеформируемого) тела угловые скорости каждой его точки одинаковы, а их линейные скорости связаны с угловой скоростью $\vec{\omega}$ соотношением:

$$\vec{\upsilon}_{A} = \vec{\upsilon}_{O} + \vec{\omega} \times \vec{r}_{OA}$$

где $\vec{\upsilon}_A$ и $\vec{\upsilon}_O$ – линейные скорости, соответственно, точек A и O в произвольной инерциальной системе координат, а $\vec{r}_{OA}$ – вектор, проведенный из точки O в точку A. В случае вращения пары автоматов как целого (без деформации, в том числе сдвиговой) это соотношение можно переписать следующим образом (рис. 3.4):

$$\vec{\upsilon}_j - \vec{\upsilon}_i = \vec{\omega}_{ij} \times \vec{r}_{ij}$$

где $\vec{r}_{ij} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i)$, а $\vec{\omega}_{ij}$ – мгновенная скорость вращения пары как целого. Если умножить векторно слева обе части последнего уравнения на $\vec{r}_{ij}$ и пренебречь вращением вокруг оси пары (полагаем $\vec{\omega}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij} = 0$, поскольку эта составляющая вращения не сказывается на деформации сдвига), то для $\vec{\omega}_{ij}$ получим следующее выражение

$$\vec{\omega}_{ij} = \frac{\vec{r}_{ij} \times (\vec{\upsilon}_j - \vec{\upsilon}_i)}{\vec{r}_{ij}^{\,2}} = \frac{\vec{n}_{ij} \times (\vec{\upsilon}_j - \vec{\upsilon}_i)}{\vec{r}_{ij}},$$

где $\vec{n}_{ij}$ – единичный вектор направления от центра автомата i к центру автомата j.

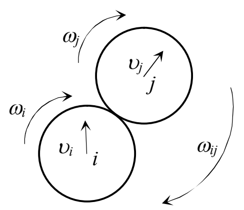


Рисунок 3.4 – Вращение пары автоматов

Тогда скорость сдвиговой деформации автомата i, при его взаимодействии с автоматом j, можно характеризовать разностью $\vec{\omega}_{ij} - \left(\vec{\omega}_i - (\vec{\omega}_i \cdot \vec{n}_{ij})\vec{n}_{ij}\right)$. Мгновенную угловую скорость сдвига можно определить как отношение скорости тангенциального смещения в точке контакта к расстоянию q_{ij}:

$$\vec{\omega}_{ij}^{sh} = \frac{\vec{V}_{ij}^{T}}{q_{ij}} = \frac{q_{ij}(\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times \vec{n}_{ij}}{q_{ij}} = (\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times n_{ij}\,.$$

Угол сдвига каждого из автоматов в момент времени T определится интегралом:

$$\vec{\gamma}^{ij} = \int_0^{\mathrm{T}} \vec{\omega}_{ij}^{sh}(t)dt = \vec{\theta}_{ij} - \vec{\theta}_i \times \vec{n}_{ij}, \qquad (3.1)$$

где $\vec{\theta}_{ij}$ – вектор поворота оси пары автоматов ij относительно начального положения. Косинус угла этого поворота определяется скалярным произведением единичных векторов

$$\cos\theta_{ij} = \vec{n}_{ij}\vec{n}_{ij}^0,$$

а направление – их векторным произведением

$$\vec{\theta}_{ij} = \frac{\arccos(\vec{n}_{ij}\vec{n}_{ij}^0)}{\sin\theta_{ij}} \vec{n}_{ij} \times \vec{n}_{ij}^0$$

В случае малых деформаций для вычисления силы сопротивления сдвиговой деформации можно использовать закон Гука:

$$\vec{f}_{ij}^e = -(G_i\vec{\gamma}_{ij} + G_j\vec{\gamma}_{ji}) \times \vec{n}_{ij} \qquad (3.2)$$

где G_i – модуль сдвига материала автомата i.

Следует отметить, что в качестве парной силы сопротивления сдвигу нужно брать сумму сил от каждого автомата (рис. 3.5). В общем случае функциональная зависимость $f(\gamma)$ может быть нелинейной, подобно тому, как это было показано для нормального взаимодействия.

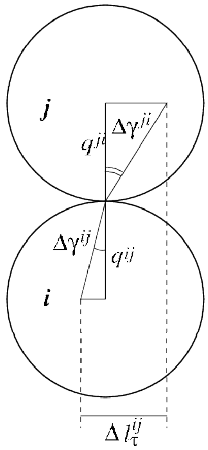


Рисунок 3.5 – Сопротивление сдвигу в паре автоматов

Как было отмечено выше, второй составляющей тангенциальной силы взаимодействия является сила вязкого трения. Она определяется величиной относительной скорости тангенциального смещения в точке контакта пары автоматов i и j

$$\vec{W}_{ij} = q_{ij}(\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times \vec{n}_{ij} + q_{ji}(\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_j) \times \vec{n}_{ij} = (\vec{\omega}_{ij} r_{ij} - \vec{\omega}_i q_{ij} - \vec{\omega}_i q_{ji}) \times \vec{n}_{ij}$$

по формуле:

$$\vec{f}_{ij}^{\upsilon}(\vec{W}_{ij}) = -\eta_{ij} \frac{\vec{W}_{ij}}{r_{ij}},$$

где η_{ij} – коэффициент вязкого трения.

Сила сухого трения $\vec{f}_{ij}^{dr}$ для случая $\vec{W}_{ij} = 0$ изменяется от нуля до максимального значения $\mu_{ij} p_{ij}$ и уравновешивает тангенциальную составляющую $\vec{f}_{ij}$ суммарной силы взаимодействия автоматов $\vec{F}_{ij}$. Здесь p_{ij} – величина нормальной составляющей силы $\vec{F}_{ij}$. Если $\vec{f}_{ij}$ становится больше $\mu_{ij} p_{ij}$, то $\vec{W}_{ij} = 0$ и на автоматы действует максимальное значение силы сухого трения.

Из формул (3.1) и (3.2) видно (например, в случае θ_{ij}=0 и θ_i=−θ_j), что сила сопротивления сдвиговой деформации не всегда препятствует относительному вращению автоматов. В то же время, вращение тела как абсолютно твердого (без деформаций) предполагает одинаковые угловые скорости у всех его элементов. В качестве меры деформации рассогласования в угловых скоростях автоматов естественно взять величину

$$\alpha_{ij}^{rot} = (\vec{\theta}_j - \vec{\theta}_i) \times \vec{n}_{ij}.$$

В случае связанных автоматов их относительный разворот будет вызывать пару сил, действующих на каждый автомат. Одна из этих сил приложена к центру автомата, а другая к точке контакта этого автомата с соседом. Таким образом, реакция автоматов на эту деформацию вызывает только их разворот и не вызывает трансляционного смещения в пространстве. Величина силы равна сумме реакций каждого автомата и определяется упругими модулями материала автоматов:

$$f_{ij}^{rot} = -(G_i + G_j) a_{ji}^{rot}$$

Если рассматривать пару автоматов как два диска, то в качестве коэффициента пропорциональности следует использовать модуль сдвига [147]. Проведенные тестовые расчеты для двумерного случая показали, что при одноосном растяжении-сжатии, а также при простом сдвиге величина упругого модуля для вычисления момента сопротивления относительному повороту практически не сказывается на расчетной диаграмме нагружения. Это можно объяснить тем, что в таких тестах мы регистрируем только силовой отклик образца, и роль вычисляемых с помощью этого модуля моментов сводится к тому, чтобы устранить возникающие рассогласования в углах поворота элементов. Возникающие моменты на поверхностях, к которым приложена нагрузка обычно не анализируются. Однако следует заметить, что в случае простого сдвига и использовании периодических граничных условий в направлении сдвига, моменты на нагружаемых поверхностях от соседних автоматов взаимно уничтожаются.

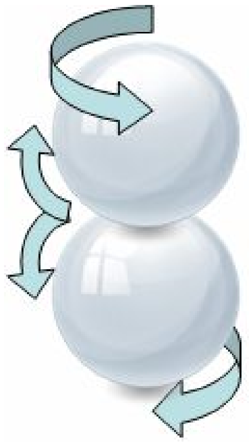


Рисунок 3.6 – Деформации в паре вследствие относительного разворота автоматов

В трехмерном случае возникает еще одна деформация, которая связана с кручением пары и определяется проекцией разности углов поворота автоматов пары на ее ось(рис. 3.6):

$$\psi_{ij} = (\vec{\theta}_j - \vec{\theta}_i)\vec{n}_{ij}$$

В случае связанных автоматов их относительный разворот будет вызывать момент сил, действующих на каждый автомат и направленный вдоль оси пары, а его знак определяется знаком деформации ψ_{ij}. Таким образом, реакция автоматов на такую деформацию вызывает только их поворот вокруг оси пары. В случае линейно упругого материала величина момента равна сумме реакций каждого автомата и определяется модулями сдвига материала автоматов.

При вычислениях удобно не разбивать эту деформацию на нормальную ψ_{ij} и тангенциальную α_{ij}^{rot} составляющие (рис. 3.6), а записать отклик на нее в векторном виде:

$$\vec{K}_{ij}^{rot} = -(G_i + G_j)(\vec{\theta}_j - \vec{\theta}_i).$$

Если количество соседей у какого-либо автомата меньше, чем координационное число упаковки N, то такой автомат является частью свободной поверхности. Причем, это может быть также поверхность трещины внутри материала. В механике сплошных сред на свободной поверхности обычно задают условия отсутствия касательных напряжений $\sigma_{ij}\tau_i = 0$ и равенство полных нормальных напряжений давлению окружающей среды $\sigma_{ij}n_i = P^{ext}$ где σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, а n_i – компоненты единичного вектора нормали поверхности тела.

По аналогии, для свободных связей автоматов, не занятых соседями, можно записать следующее условие:

$$2G_i(\xi_{ic} - \xi_i) + P_i = P^{ext}$$

Отсюда можно определить расстояния q_{ic} до свободной поверхности от центра такого автомата

$$q_{ic} = \frac{d_i}{2}(1 - (P^{ext} - P_i)/2G_i + \xi_i)$$

которые нужно использовать для определения вступления в контакт с новыми соседями:

$$q_{ic} + q_{jc} \le r_{ij}$$

Такой критерий обеспечит плавный вход в контакт без образования притягивающих или отталкивающих сил во вновь образовавшихся парах.

3.2 Роль вращения в методе подвижных клеточных автоматов

Вращательное движение присуще природным системам на всех масштабах – от элементарных частиц до галактик. В физической мезомеханике, которая изучает нагруженное твердое тело как многоуровневую самоорганизующуюся систему, поворот элементов структуры материала рассматривается как важнейшая составляющая механизма его деформации [148, 149]. В методе подвижных клеточных автоматов, – дискретном методе моделирования, призванном описывать поведение материалов на мезо- и макроуровнях, – вращение учитывается как самостоятельная степень свободы автомата наравне с поступательным движением его центра масс [18]. Такой подход использовался с самого начала развития метода как постулат [82]. При стремлении размеров автомата к нулю, метод подвижных клеточных автоматов должен описывать движение некой сплошной среды. В работе [150] показано, что использование линейных функций отклика подвижных клеточных автоматов при стремлении их размеров к нулю приводит к хорошо известному закону Гука для получаемого таким образом континуума. Поскольку работе [150] не учитывалось вращение автоматов, то остается не определенным, какую среду будет описывать метод МСА при бесконечно малом размере автомата – классическую, где элементарная точка среды не имеет вращательной степени свободы, или микрополярную, где элементарная точка среды имеет отличный от нуля момент инерции и характеризуется независимым поворотом [151].

Результаты моделирования методом МСА показали, что он позволяет описывать свойства классического континуума [152–154]. Это позволило естественным образом объединить его с конечно-разностным методом решения уравнений классической сплошной среды для эффективного исследования проблем, где явно можно выделить локальные области интенсивного перемешивания материала при незначительном деформировании остальной части образца [106]. При этом следует отметить, что в континуальной части упругая деформация описывалась в форме закона гипоупругости (1.17–1.25), и при расчете напряжений учитывался поворот сетки [108]. Поскольку каждый узел конечно-разностной сетки смещался только поступательно, то для учета поворотов рассматривалась дисторсия связанных с ними ячеек в результате движения соседних узлов сетки.

Таким образом, существует два способа учета вращения в процессе деформации. Первый связан с явным учетом поворотов, который ведет к увеличению размерности фазового пространства, второй – опосредованный, то есть реализующийся, как результат коллективного поведения элементов, составляющих моделируемую среду.

С учетом вышесказанного интересным является рассмотрение особенностей каждого способа учета вращательного движения, и выявление преимуществ и недостатков каждого из них в рамках метода подвижных клеточных автоматов.

Во всех численных методах классической механики сплошной среды решение уравнений движения ищется в виде смещений (или линейных скоростей) узлов расчетной сетки, и туда никак не входят повороты (угловые скорости) этих узлов. Повороты элементов среды можно рассчитать, если рассматривать деформации расчетных ячеек, содержащих данный узел. Очевидно, что подобным образом можно учитывать вращение и в методе подвижных клеточных автоматов. Для этого достаточно в качестве скорости вращения автомата принять среднюю скорость вращения его ближайших соседей, с которыми он взаимодействует. В двумерном случае это сделать легко, поскольку поворот описывается скалярной величиной. Средняя скорость вращения определится простым выражением

$$\omega_i = \frac{\sum_j \omega_{ij}}{N},$$

где ω_{ij} – скорость вращения оси пары автоматов ij, а N – количество взаимодействующих соседей.

В трехмерном случае повороты описываются ортогональными тензорами или векторами, имеющими три независимые компоненты. Задачу об определении среднего вращения можно сформулировать так. Имеется несколько точек j=1..N, определяемых векторами $\vec{r}_{ij}$, проведенными из неподвижной точки i. Каждая точка j движется относительно точки i со скоростью $\vec{\upsilon}_{ij}$. Такому движению можно сопоставить вращение некоторого твердого тела, образуемого j-ми точками, вокруг точки i. Реальное движение каждой точки j будет складываться из среднего движения, как твердого тела, и деформации этого тела. Нужно определить скорость вращения такого твердого тела $\vec{\omega}_{ij}$.

Как известно [146], кинетический момент твердого тела при вращении вокруг оси, заданной единичным вектором $\vec{n}_\omega$, определяется как

$$K = \sum_j \vec{r}_j \times m_j \vec{\upsilon}_j = \sum_j m_j \upsilon_j \rho_j = \sum_j m_j \omega \rho_j^2 = J\omega ,$$

где $\rho_j = \left| \vec{n}_\omega \times \vec{r}_j \right|$ – расстояние от оси вращения до точки j, а J – момент инерции тела относительно оси $\vec{n}_\omega$. Тогда требование, чтобы движение системы точек j=1..N в среднем соответствовало вращению некоторого твердого тела, можно записать как равенство соответствующих кинетических моментов:

$$\vec{\omega} \sum_j m_j \rho_j^2 = \sum_j \vec{r}_{ij} \times m_j \vec{\upsilon}_{ij} ,$$

Учитывая, что массы всех автоматов одинаковы и $\vec{r}_{ij} \times \vec{\upsilon}_{ij} = r_{ij}^2 \vec{\omega}_j$, искомая средняя скорость вращения окружения автомата в трехмерном случае запишется как

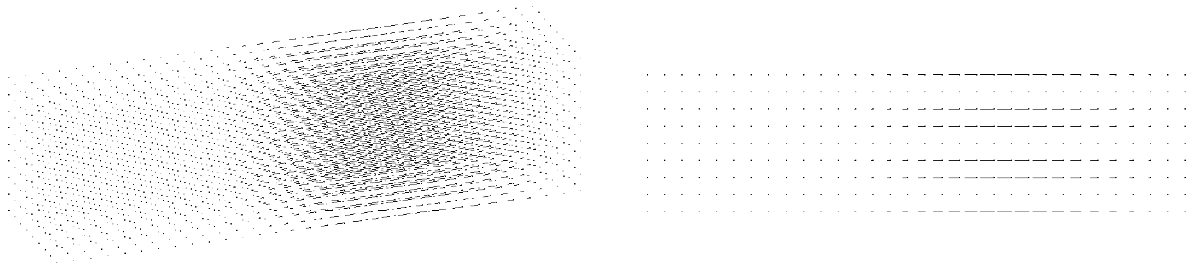
$$\vec{\omega}_i = \frac{\sum_j r_{ij}^2 \vec{\omega}_j}{\sum_j \left| \vec{n}_\omega \times \vec{r}_{ij} \right|^2} .$$

Расчеты с таким учетом вращений показали, что в этом случае мы получаем точно такое же поведение модельной среды, как и при явном расчете поворотов в качестве самостоятельной степени свободы автоматов. По крайней мере, тесты на сжатие-растяжение, сдвиг, а также решение задачи Лэмба не выявило значительных количественных различий.

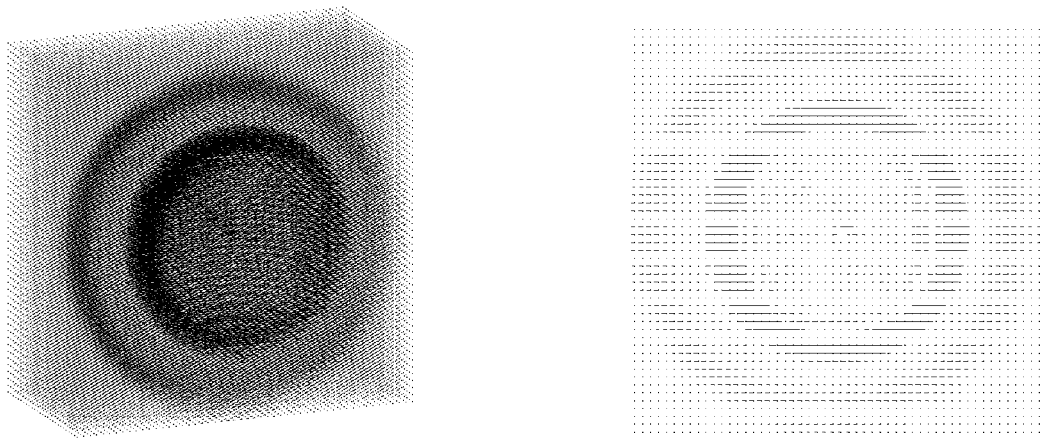
Несмотря на сходство получаемых результатов, следует отметить, что явный учет вращений автоматов позволяет моделировать более сложные среды с неявным учетом их структуры. Например, в работе [155] показано, что тензор напряжений, в общем случае, для таких моделей является несимметричным, как и должно быть в случае среды Коссера со стесненным вращением [156]. Кроме того, на основе расчетов методом дискретных элементов (с явным учетом вращений) можно построить определяющие соотношения для микрополярной среды, описывающей движение гранулированных материалов в рамках континуума [157].

Учет поворота одновременно двумя рассмотренными способами дает возможность реализации среды Коссера в методе МСА, если при этом собственное вращение автоматов рассматривать как независимое. Естественно, что такой подход приведет к необходимости введения дополнительных упругих модулей, которые рассматриваются в теории микрополярных сред и, вообще говоря, могут быть определены экспериментально [156]. Как известно, в этом случае в среде возможно распространение новых типов упругих волн, в том числе так называемых волн продольного вращения. На рис. 3.7 показано распространение плоской и сферической волн продольных вращений, рассчитанных методом МСА. Плоская волна получена путем задания всем автоматам правого торца рассматриваемого бруса одинаковой угловой скорости, а сферическая – путем задания угловой скорости одному автомату в центре куба. Несмотря на то, что начальный сигнал был в обоих случаях колоколообразным (одного знака), исходное направление вращения сохраняется только в случае плоской волны. В случае точечного источника волна состоит из областей разноименных вращений, подобно тому, как сферическая продольная упругая волна состоит из области сжатия и следующей за ней области разрежения [158].

В случае моделирования классической сплошной среды более корректным будет учет поворота через вращение окружения. Недостатком такого подхода является неоднозначность при пересчете поворота (среднего) в случае разрыва одной или нескольких связей или образования новой связи между автоматами, которые могут происходить при интенсивных деформациях. А ведь для моделирования именно таких процессов метод МСА зарекомендовал себя как наиболее эффективный.



а)



б)

Рисунок 3.7 – Плоская (а) и сферическая (б) волны продольных вращений в поле векторов скоростей вращений подвижных клеточных автоматов (слева показаны трехмерные картины, а справа – сечения в середине образцов)

Рассмотрим, насколько важен учет вращения элементов в методе MCA. Для этого проанализируем результаты по распространению упругих волн в полупространстве от точечного источника на его поверхности (задача Лэмба), полученные с учетом вращения элементов и без него (рис. 3.8). В силу симметрии задачи рассматривалась расчетная область, представляющая собой 1/4 куба, ее размеры составляли 0,25×0,25×0,25 м. Размер автомата – 0,0025 м, материал – сталь (ρ=7800 кг/м^3, v_P=5,95 км/с, v_S=3,19 км/с). На плоскостях X=0 и Y=0 задавались условия симметрии, остальные грани куба считались свободными.

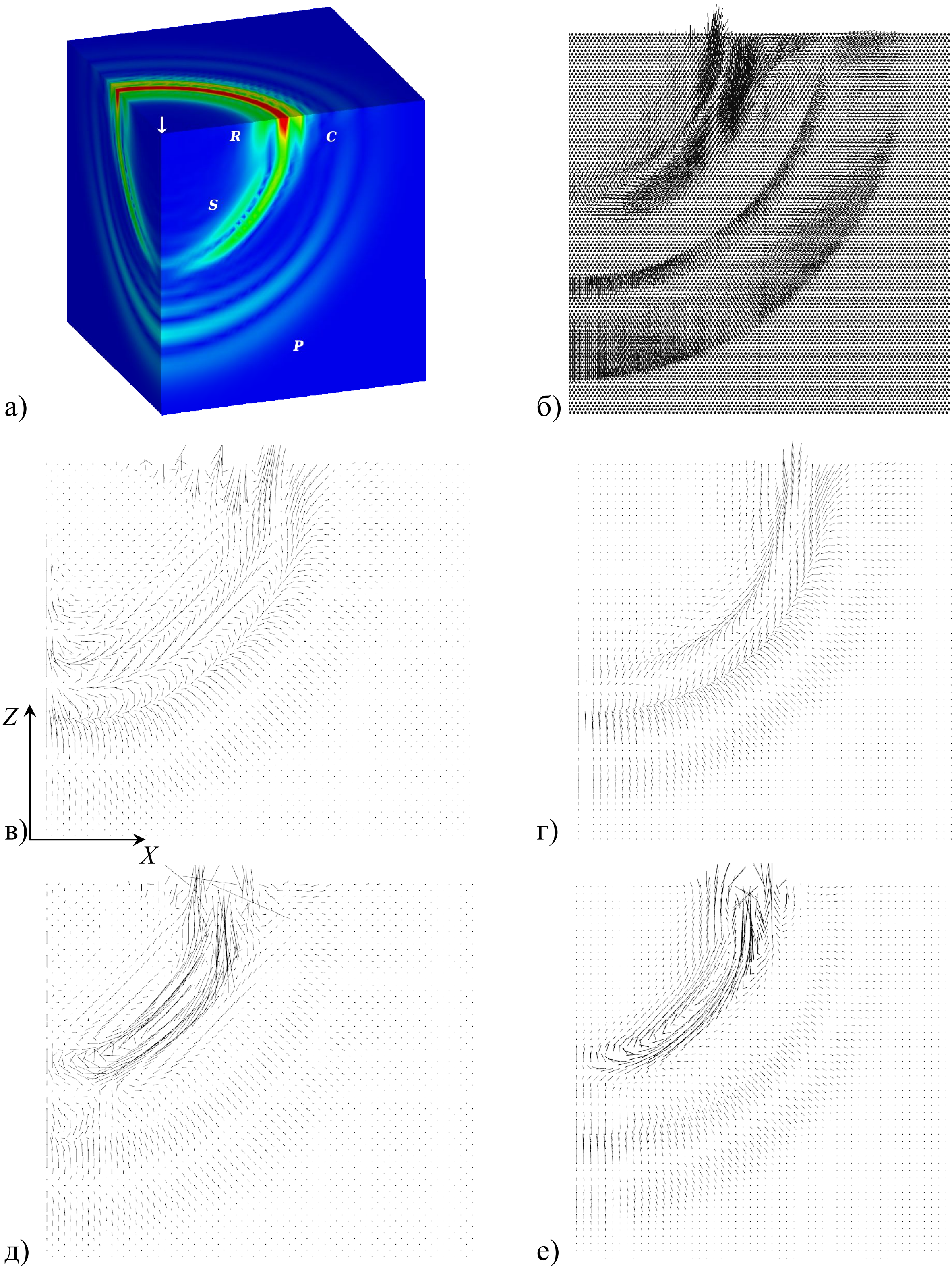


Рисунок 3.8 – Поле скоростей подвижных клеточных автоматов при решении задачи Лэмба для различных вариантов модели и упаковок автоматов: (*а,е*) – кубическая упаковка с учетом вращения элементов, (*б*) – плотная упаковка на плоскости без учета вращения, в – ГЦК упаковка без учета вращения, (*г*) – кубическая упаковка без учета вращения, (*д*) – ГЦК упаковка с учетом вращения элементов

Импульс прикладывался в точке начала координат (показано на рис. 3.8,*а* стрелкой) в виде «купола» синусоиды длительностью 5 мкс. Все результаты на рис. 3.8,*в-е* представлены для сороковой микросекунды в плоскости Y=0.

Как показано в разделе 2, в результате такого нагружения в среде на некотором расстоянии от источника формируются продольная P и поперечная S упругие волны, распространяющиеся с различными скоростями. Наличие свободной поверхности приводит к появлению конических и поверхностных волн.

Проведенные расчеты показывают, что результаты, полученные без учета вращения, зависят от используемой упаковки автоматов. Кроме того, в этом случае волна Релея полностью отсутствует, а сдвиговая волна движется непосредственно за продольной с такой же скоростью, что является качественно неверным результатом (рис. 3.8,*в-г*). Следует отметить, что в двумерных расчетах плотная упаковка, которая обладает бóльшим порядком симметрии, даже без учета вращений обеспечивает качественно верные результаты, количественно отличаются лишь скорости распространения упругих волн (рис. 3.8,*б*). Учет вращения обеспечивает независимость результатов от упаковки автоматов и физическую корректность описания упругих волн в сплошной среде (рис. 3.8,*д-е*).

Вторым примером, показывающим важность учета вращений в методе МСА, являются результаты теста на простой сдвиг, показанные на рис. 3.9. Здесь представлены данные только для ГЦК упаковки автоматов, потому что соответствующие диаграммы для кубической упаковки совпадают с ними. Видно, что без учета вращений угол наклона рассчитываемых диаграмм в два раза превышает значение модуля сдвига G=79 ГПа. Это объясняется тем, что в этом случае заданное смещение Δx целиком соответствует сдвиговой деформации $\varepsilon_{ij}=\gamma=\Delta x/h$, в то время как согласно формуле для компонент тензора малых деформаций $\varepsilon_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial x}+\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)$ при простом сдвиге должно быть ε_{ij} = 0,5γ.

То есть при простом сдвиге образец испытывает сдвиговую деформацию равную 0,5γ и одновременно поворачивается на такой же угол как целое. Действительно, в случае учета вращений все автоматы образца при его простом сдвиге оказываются повернутыми на угол равный 0,5γ и сдвиговая деформация во всех парах имеет то же самое значение.

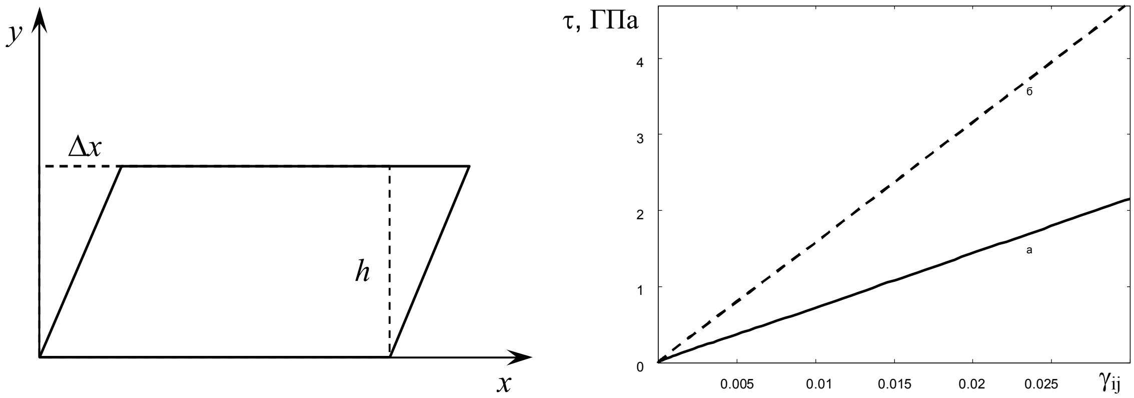


Рисунок 3.9 – Схема деформирования модельного образца и диаграммы нагружения при простом сдвиге. Обозначения кривых соответствуют: (*а*) – ГЦК упаковке с учетом вращения элементов, (*б*) – ГЦК упаковке без учета вращения

Таким образом, проведенные исследования показали, что учет поворота либо как самостоятельной степени свободы автоматов, либо через вращение окружения позволяет корректно описывать классическую сплошную среду на основе метода подвижных клеточных автоматов. Для того чтобы описывать более сложные среды, например, среду Коссера, нужно сохранить в методе оба способа учета поворота, при этом самостоятельную степень свободы рассматривать как независимый поворот.

3.3 Изучение возможности идентификации наноскопических пор на основе трения скольжения

Нанесение наноструктурных покрытий позволяет значительно повысить эксплуатационные характеристики элементов машин, механизмов и конструкций. При этом механические свойства таких покрытий сильно зависят от наличия в них дефектов и повреждений наноразмерного масштаба. В связи с этим, актуальным является развитие методов диагностики таких дефектов сплошности наноразмерного масштаба. Одним из методов неразрушающего контроля качества покрытия, позволяющим оценить дефекты структуры тонких поверхностных слоев в твердом теле, является подход, связанный с использованием силы трения в качестве измеряемого и анализируемого параметра отклика системы [159], и названный трибоспектроскопией.

В данной работе возможности применения трибоспектрального способа для анализа дефектности поверхностных слоев твердых тел изучены, путем численного моделирования на примере металла с высокопрочным керамическим покрытием.

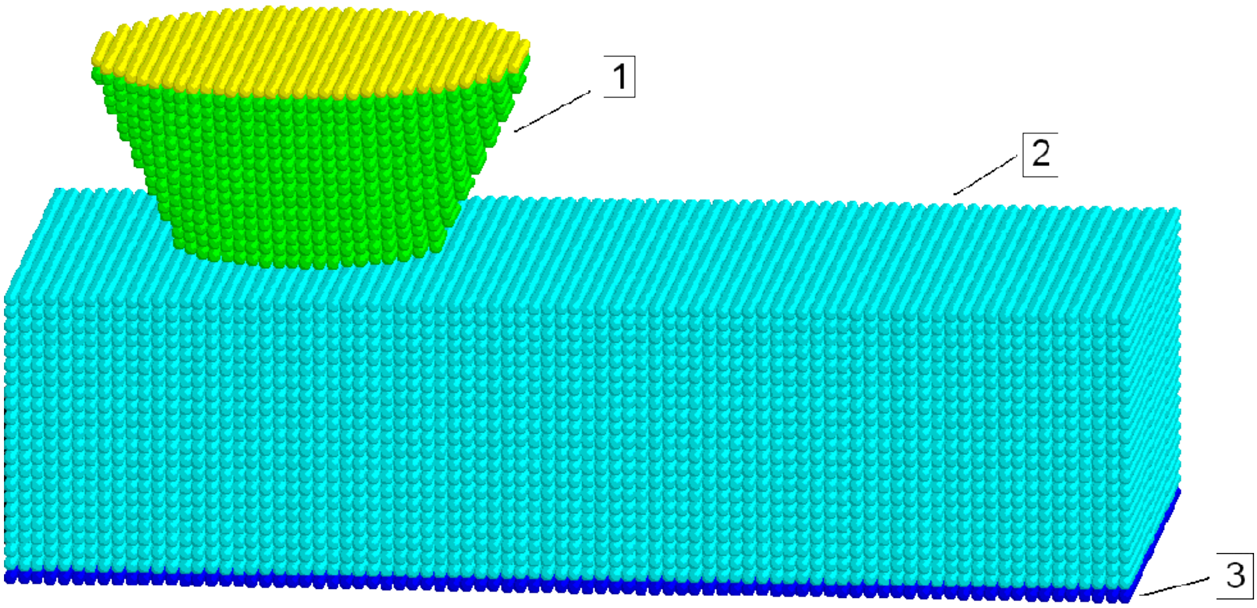


Рисунок 3.10 – Моделируемая система: 1 – контр тело, 2 – керамическое покрытие, 3 – стальная подложка

Моделировался стальной образец с покрытием из керамики ZrO_2 (рис. 3.10). Толщина покрытия была выбрана равной $H = 60$ нм, длина образца $L = 250$ нм, ширина – $M = 125$ нм, размер автомата $d = 3$ нм. Керамическое контртело имело форму конуса с диаметром основания 60 нм. Движение контртела моделировалось заданием автоматам его верхней поверхности постоянной скорости $V = 5$ м/с в горизонтальном направлении. При этом нижняя поверхность образца была неподвижной, а его боковые поверхности свободными. При движении контртела проводилась регистрация силы сопротивления его движению по поверхности, ассоциируемая с силой трения F. На основе регистрируемых данных силы трения $F(t)$ строилось преобразование Фурье [131].

Поврежденность поверхностного слоя моделировалась генерацией наноскописческих нарушений сплошности покрытия. Анализировались протяженные повреждения – нанопоры. Рассматривалось периодическое расположение нанопор с расстоянием $P = 30$ нм. При этом ширина поры составляла $w = 12$ нм, а высота – $h = 3$ нм. В работе анализировалась возможность определения расстояния между дефектами.

Преобразование Фурье регистраций силы трения скольжения для бездефектного образца (рис. 3.10) приведено на рисунке 3.11. На данном спектре хорошо видна частота, соответствующая периодической составляющей искусственной шероховатости поверхности образца (искусственная шероховатость связана с дискретностью структурных элементов – клеточных автоматов), и равная $f_d = V/d = 1{,}6$ ГГц. На графике также хорошо видны пики, соответствующие частотам nf_d (где n – целое число). Амплитуда этих пиков убывает с ростом n. Отметим, что значение амплитуды ~0.4 нм и период искусственных неровностей в нашей модели (3 нм) качественно соответствуют экспериментально измеряемым параметрам шероховатости поверхности на наноскопическом масштабном уровне [160].

Определим собственные частоты моделируемой системы. Эти частоты можно оценить по аналогии со стержнем, как было описано в подразделе 2.2. Скорость поперечного звука $v_S = \sqrt{\dfrac{G}{\rho}}$, скорость распространения продольного звука $v_P = \sqrt{\dfrac{K + G \cdot \frac{4}{3}}{\rho}}$. Для керамики ZrO_2 $G = 30$ ГПа, $K = 70$ ГПа, $\rho = 5600$ кг/м^3, следовательно $v_S = 2315$ м/с и $v_P = 4432$ м/с.

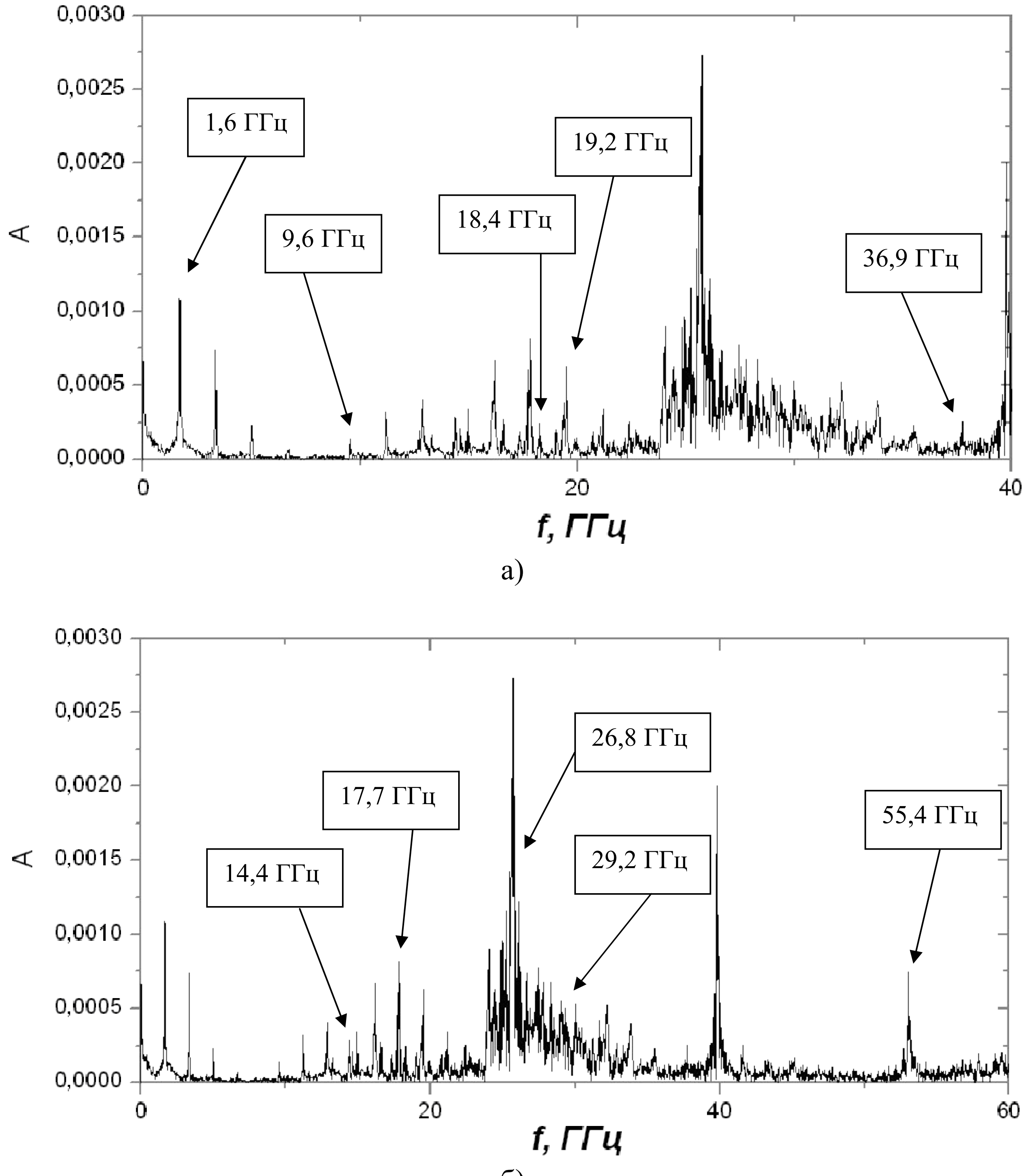


Рисунок 3.11 – Спектр Фурье регистраций силы трения скольжения для бездефектного образца (масштаб 1..40 ГГц (*а*) и масштаб 1..60 ГГц (*б*)).

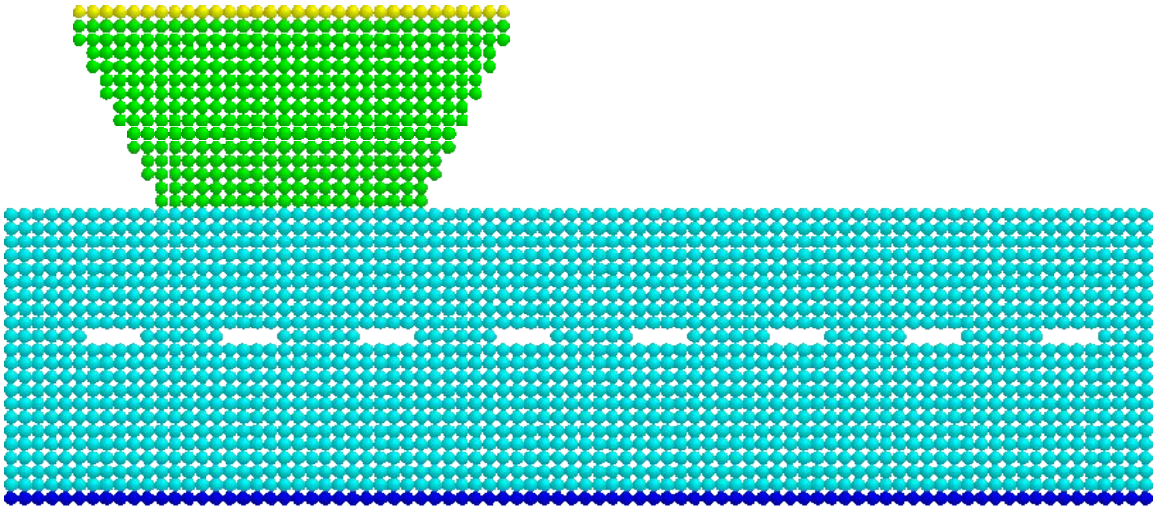
Оценим собственные частоты для покрытия. Принимая l = 60 нм, в случае стержня, закрепленного на одном конце первая гармоника для сдвиговой волны равна 9,6 ГГц, а для продольной – 19,2 ГГц. В случае свободного стержня первая гармоника для сдвиговой волны равна 18,4 ГГц, а для продольной – 36,9 ГГц. Эти частоты видны на рисунке 3.11,*а*. Принимая l = 125 нм (ширина образца), получим для свободного стержня и продольной скорости частоту 17,7 ГГц (см. рис. 3.11,*б*).

Оценим собственные частоты для индентора. Принимая l = 40 нм, в случае закрепленного стержня первая гармоника для сдвиговой волны равна 14,4 ГГц, а для продольной – 26,8 ГГц. В случае стержня со свободными концами первая гармоника для сдвиговой волны равна 29,2 ГГц а для продольной – 55,4 ГГц.

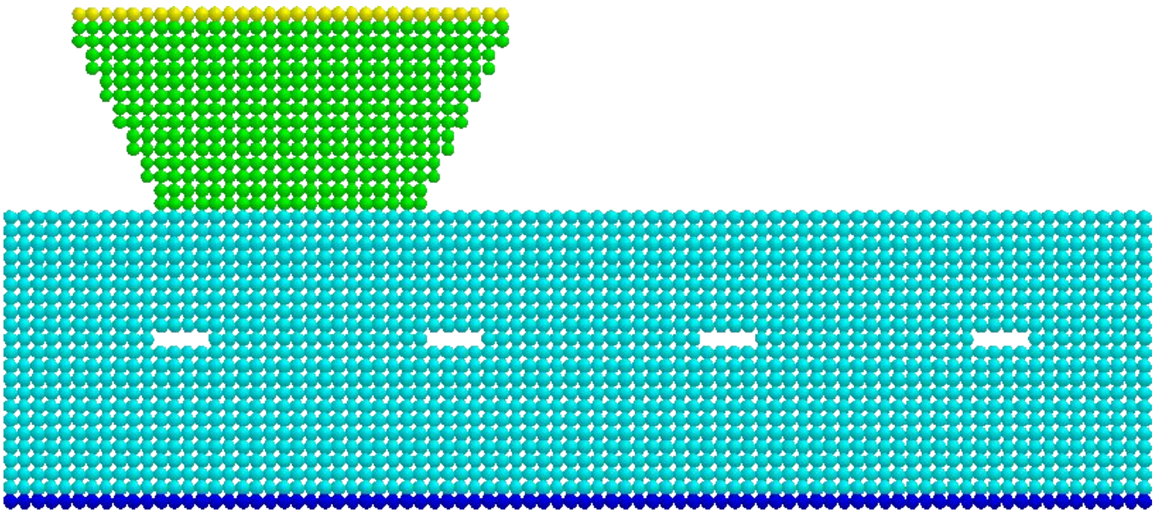
Все определенные частоты соответствуют пикам на спектре рис. 3.11,*б*. Не смотря на то, что применение описанной методики оценки собственных частот для такой сложной системы, как показана на рис. 3.10 не является очевидным, контрольный расчет собственных частот в программе ANSYS дает результаты отличающиеся от найденных не более чем на 10%.

Наличие периодически расположенных нанопор (рис 3.12) приводит к появлению выраженного низкочастотного пика на спектрах Фурье регистраций силы трения скольжения (рис. 3.13). Номером 1 на рис. 3.13 обозначен пик, соответствующий характерному расстоянию между нанопорами, а номером 2 – пик, соответствующий длине пути индентора. Частота пика, соответствующего периоду следования нанопор, вычисляется по формуле V/P, где V – скорость движения индентора а P – период следования нанопор. Эта частота в нашем случае равна 0,15 ГГц.

На рис. 3.14 представлены спектры Фурье для образцов с разной плотностью нанодефектов. На этих спектрах можно выделить частоту, отвечающую за размер нанодефекта (~0,33 ГГц), которая соответствует линейным размерам ~15 нм, и частоты, отвечающие за плотность (период следования) нанодефектов (~0,1 ГГц и ~0,15 ГГц), которые соответствуют линейным размерам ~50 нм и ~35 нм.



а)



б)

Рисунок 3.12 – Нанопоры длинной 12 нм, расположенные на глубине 30 нм, с периодом следования 30 нм (*а*) и 60 нм (*б*)

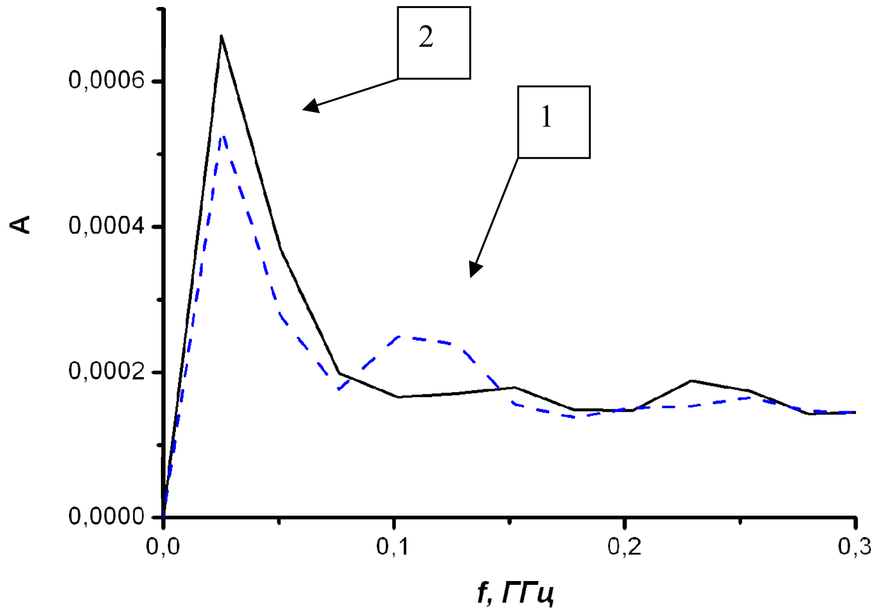


Рисунок 3.13 – Спектры Фурье для бездефектного образца (непрерывная линия) и образца с нанопорами (пунктирная линия), представленного на рис. 3.12,*б*

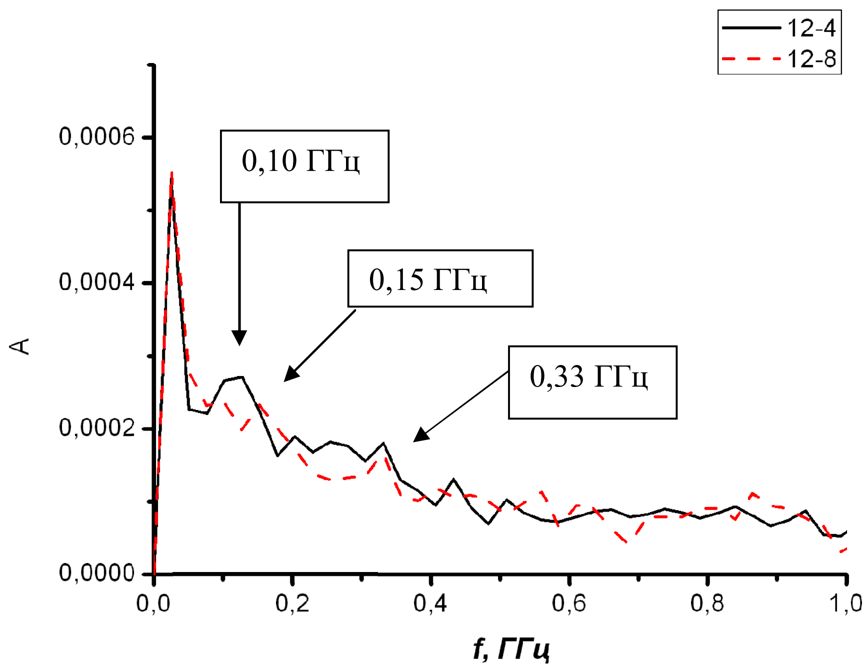


Рисунок 3.14 – Спектры Фурье для образов с нанопорами, представленных на рис 3.12,*а* (кривая 12–4) и рис 3.12,*б* (кривая 12–8)

Таким образом, спектральный анализ позволяет сделать оценку периода следования нанопор. В данном примере оценочное расстояние равно 35 нм, что с точностью ~85% соответствует заданному значению 30 нм.

Выявленный эффект влияния наноповреждений на силу трения скольжения, очевидно, связан с прогибом поверхности при прохождении наноиндентора над нанопорой [159, 161]. В этой связи чувсвительность определения пор должна зависеть от площади контакта контртела с поверхностью. Используемый в данных расчетах диаметр контакта контртела с поверхностью (60 нм) соответствует часто используемым наноскопическим инденторам и контртелам.

Поскольку трехмерные расчеты очень требовательны к вычислительным ресурсам, то длина пути индентора в расчетах задавалась относительно небольшой. Следовательно, данные представленные на рисунках 3.13 и 3.14 имеют низкое разрешение по частоте. При увеличении длины пути индентора, точность полученных данных будет расти как за счет увеличения разрешения по частоте, так и за счет того, что индентор пройдет большее количество пор.

Таким образом, полученные результаты позволяют предполагать, что нанопоры порядка 12–80 нм могут быть идентифицированы в реальных экспериментах на основе анализа спектра силы трения скольжения. В основу экспериментальной установки может быть положена система, предложенная в [162]. Идея установки состоит в том, что контртело, лежащее на поверхности, приводится в движение, при этом с высокой точностью измеряется как перемещение контртела, так и действующая на него сила. Следовательно, спектроскопический анализ силы трения может рассматриваться как новый перспективный метод неразрушающего контроля поврежденности нанопокрытий и поверхностных слоев твердого тела наноскопической толщины.