

**Добрынин Сергей Александрович**

**РАЗВИТИЕ МЕТОДА ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ  
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕНЕРАЦИИ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ  
УПРУГИХ ВОЛН ПРИ КОНТАКТНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ  
ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Специальности:

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

01.04.07 – физика конденсированного состояния

**А в т о р е ф е р а т**

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук



Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук  
Институте физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН

Научные руководители: доктор физико-математических наук,  
профессор *Псахье Сергей Григорьевич*

кандидат физико-математических наук,  
доцент *Смолин Алексей Юрьевич*

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор *Колупаева Светлана Николаевна*

доктор технических наук,  
доцент *Панин Сергей Викторович*

Ведущая организация: Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
Томский государственный университет  
систем управления и радиоэлектроники

Защита состоится « 29 » января 2010 г. в 16 ч. 00 мин. на заседании  
диссертационного совета Д 003.038.01 при ИФПМ СО РАН по адресу:  
634021, Томск, пр. Академический, 2/4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФПМ СО РАН.

Автореферат разослан « 29 » декабря 2009 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор технических наук, профессор

О.В. Сизова

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Объект исследования и актуальность темы. Исследование особенностей контактного взаимодействия твердых тел, безусловно, является актуальной задачей, поскольку играет важную роль практически во всех технических системах. Сложность исследования контактного взаимодействия связана, прежде всего, с динамикой и многомасштабностью этого процесса. Его экспериментальное изучение ограничено, в первую очередь, из-за труднодоступности зоны контакта непосредственно во время взаимодействия. В связи с этим, для исследования динамики контактного взаимодействия в последние годы в России и за рубежом интенсивно развиваются подходы, основанные на компьютерном моделировании.

Обычно для моделирования на разных масштабах используют специфические методы описания. Например, при исследовании макроскопического поведения материала при контактном взаимодействии используются методы механики сплошной среды (Johnson K.L., Mihailidis A.). Для описания трения на уровне реального контакта можно использовать простую двумерную модель двух твердых тел с регулярным рельефом, в которой неровности на поверхности представляют собой выступы треугольной формы (Poschel T.). Эта модель основана на предположении о масштабной инвариантности рельефа поверхности и коэффициента трения на всех масштабных уровнях и учитывает только геометрические и механические факторы. Она позволяет получить зависимость силы трения от скорости скольжения, нормальной нагрузки, а также от угла при вершине неровностей и их размера вдоль направления скольжения. Моделирование контактного взаимодействия на атомном уровне осуществляется методом молекулярной динамики (Pokropivny V.V., Landman U.). Существуют также многоуровневые подходы к описанию трения, в которых шероховатость поверхности описывается на нескольких масштабных уровнях (Горячева И.Г., Попов В.Л., Tworzydło W.W.).

В последнее время для моделирования поведения материала на мезомасштабном уровне хорошо зарекомендовал себя метод подвижных клеточных автоматов. Этот метод позволяет в явном виде описывать такие важные эффекты как разрушение, образование частиц износа, перемешивание материала, образование мостиков адгезионного схватывания, что дает возможность моделировать поведение материала в пятне контакта в динамике и детально исследовать механизмы эволюции структуры, отвечающие за те или иные закономерности контактного взаимодействия.

В связи с этим целью настоящей работы является развитие метода подвижных клеточных автоматов для численного исследования особенностей распространения упругих волн, процессов деформации и разрушения в области контактного взаимодействия твердых тел.

Для достижения указанной цели в работе ставились следующие задачи.

- 1) Развить метод подвижных клеточных автоматов путем многочастичного расчета тангенциального взаимодействия в рамках единой схемы для 2D и 3D задач.
- 2) Разработать методику корректного описания методом подвижных клеточных автоматов процессов распространения упругих волн в твердых телах со свободной поверхностью.
- 3) Разработать методику изучения особенностей распространения упругих волн в материалах со свободной поверхностью на основе анализа временных зависимостей компонент скорости, интенсивности напряжений и давления для автомата-свидетеля при моделировании методом подвижных клеточных автоматов.
- 4) Численно исследовать закономерности изменения частотного спектра упругих волн, возникающих при контактном взаимодействии, в зависимости от параметров поверхностного слоя.
- 5) На основе анализа экспериментальных данных по акустической эмиссии при трении выявить закономерности изменения акустического спектра в зависимости от особенностей процесса изнашивания.
- 6) Развить метод подвижных клеточных автоматов для 3D-моделирования упругого контактного взаимодействия.

Научная новизна работы заключается в следующем.

- 1) Предложена новая векторная форма записи сил сдвигового взаимодействия подвижных клеточных автоматов, а также сил сопротивления их взаимному повороту, которая позволила реализовать метод подвижных клеточных автоматов для трехмерных задач с учетом вращения элементов.
- 2) Обоснован способ расчета пространственного вращения подвижных клеточных автоматов, основанный на анализе относительного перемещения окружения.
- 3) Показана важность учета вращения подвижных клеточных автоматов для адекватного моделирования процессов деформации твердых тел.
- 4) Анализ, основанный на вейвлет-преобразовании регистраций упругих волн в модельной паре трения, позволил выявить сложную структуру возникающих колебаний. В частности показано, что изменение профиля трущихся поверхностей приводит к частотной модуляции генерируемых упругих волн.
- 5) На основе трехмерных расчетов показана возможность идентификации наноскопических пор в приповерхностных слоях материала на основе анализа изменения силы сопротивления трению скольжения наноскопического контртела.

### Научная и практическая ценность.

Предложенный в методе подвижных клеточных автоматов учет материального вращения через осредненное движение соседей значительно расширяет возможности метода, в частности позволяет описывать микрополярные среды с независимым поворотом.

Разработанные методики частотно-временного анализа, а также результаты такого анализа спектров упругих волн, полученных при моделировании процессов трения, могут быть полезны при обработке экспериментальных данных по акустической эмиссии с целью получения информации об особенностях процессов деформации и разрушения, протекающих в зоне трения непосредственно во время контактного взаимодействия.

Результаты исследования частотных спектров силы сопротивления трению скольжения наноскопического контртела могут лечь в основу экспериментальных методов изучения тонких поверхностных слоев и покрытий.

Разработанные компьютерные программы и подходы к исследованию процессов трения использовались при работе над проектами Российского фонда фундаментальных исследований № 07-08-00192-а, № 08-08-12055-офи, проектами Программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения, механики и процессов управления РАН № 4.13.1 (2006–2008 гг.), № 13.13.3 (2009 г.) и проекта СО РАН №127, выполняемого совместно со сторонними научными организациями (2009 г.).

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях: на Всероссийских конференциях молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (г. Томск, 2008, 2009); на Международных научно-практических конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии» (г. Томск, 2008, 2009); на Международных конференциях по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов (г. Томск, 2008, 2009); на Международных летних школах «Advanced Problems in Mechanics» (г. Санкт-Петербург, 2008, 2009); на Всероссийской конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» посвященной 130-летию Томского государственного университета и 40-летию НИИ прикладной математики и механики (г. Томск, 2008); на Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам «ВМСППС» (г. Алушта, Украина, 2009); на Всероссийской конференции «Научная сессия ТУСУР 2009» (г. Томск, 2009); на Международной школе-конференции «Физика и химия наноматериалов» (г. Томск, 2009); на Всероссийской конференции «Проблемы механики: теория, эксперимент и новые технологии» (г. Новосибирск, 2009).

На защиту выносятся следующие положения.

- 1) Способ расчета тангенциального взаимодействия в методе подвижных клеточных автоматов в рамках единой схемы для 2D и 3D задач.
- 2) Роль используемой упаковки и учета материального вращения при моделировании методом частиц распространения сдвиговых упругих волн в материалах.
- 3) Результаты моделирования контактных задач, обосновывающие возможность экспериментального изучения процессов изнашивания на основе анализа акустических спектров.
- 4) Корреляция определенных частот акустического спектра, возникающих при трении скольжения, характерным размерам частиц износа, полученная на основе частотно-временного анализа экспериментальных данных.
- 5) Результаты 3D моделирования, обосновывающие возможность экспериментального изучения особенностей дефектной структуры в приповерхностных слоях материала на основе анализа изменения силы сопротивления движению наноскопического контртела.

Личный вклад автора состоит в разработке новых возможностей развитого метода моделирования, проведении большей части численных расчетов, интерпретации результатов, формулировании основных научных положений и выводов. Автор творчески участвовал в написании всех статей и докладов по теме диссертации.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех разделов, заключения и списка использованных источников из 162 наименований, всего 130 страниц, включая 55 рисунков и 2 таблицы.

### ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель работы и ее задачи, перечислены полученные новые результаты, раскрыта их научная и практическая ценность, представлены положения, выносимые на защиту, и описана структура диссертации.

В первом разделе диссертационной работы рассмотрены особенности контактного взаимодействия твердых тел. Приведены основные характеристики геометрии шероховатых поверхностей. Рассмотрена структура площади фактического контакта, состоящая из пятен касания и составляющая несколько процентов от площади номинального контакта. Описаны динамические явления при трении, такие как вибрация и генерация акустических сигналов.

Кратко изложены современные методы моделирования трения на макро-, мезо- и микро-масштабных уровнях, в том числе многомасштабные модели и модели, позволяющие учитывать динамику трения. Обоснован выбор используемого в дальнейшем метода подвижных клеточных автоматов.

Далее подробно рассмотрен метод подвижных клеточных автоматов

(МСА), а также его совмещение с континуальными методами (дискретно-континуальный подход). Использование рассмотренных методов позволяет эффективно моделировать контактные задачи с учетом разрушения и перемешивания вещества в зоне контакта в динамике.

Основным отличием метода МСА от классических клеточных автоматов является способность элементов к пространственному перемещению и применение понятия состояния к относительному положению пары автоматов. В рамках модели возбудимых автоматов можно получить уравнения движения подвижных автоматов. Привлечение понятий и параметров метода частиц позволяет записать их как уравнения Ньютона-Эйлера с учетом многочастичности взаимодействия (1), где  $\vec{R}_i$  — радиус-вектор центра автомата  $i$ ,  $\vec{\theta}_i$  — вектор его поворота,  $m_i$  — масса,  $\hat{J}_i$  — момент инерции,  $q_{ij}$  — расстояние от центра автомата  $i$  до точки его контакта с автоматом  $j$ ,  $\vec{n}_{ij} = (\vec{R}_j - \vec{R}_i) / (q_{ij} + q_{ji})$ , сила  $\vec{F}_{ij}$  описывает парное взаимодействие автоматов  $i$  и  $j$ ,  $\vec{F}_i^\Omega$  — объемно-зависящая (многочастичная) сила, действующая на автомат  $i$ .

Для вычисления сил центрального взаимодействия в паре автоматов вводится соответствующая линейная деформация автомата  $i$  при его взаимодействии с автоматом  $j$   $\xi_{ij} = (q_{ij} - r_i) / r_i$ , где  $r_i$  — радиус автомата  $i$ . Тогда относительное изменение объема  $\Omega_i$  автомата может быть определено через среднюю деформацию  $\bar{\xi}_i$  по всем  $N$  соседям автомата  $i$  и размерность задачи  $D$  по формуле (2). Заметим, что в методе МСА автомат не имеет определенной формы и характеризуется одним размерным параметром. Эффективно понятие формы вводится для вычисления объема, в этом случае автомат ассоциируется, например, с кубом для кубической упаковки, ромбододекаэдром для ГЦК упаковки и шестигранной призмой в случае плотной упаковки для плоских задач (рис. 1). Объемно-зависящая сила, действующая на автомат  $i$  и обусловленная давлением соседних автоматов  $P_j$ , определится по формуле  $\vec{F}_i^\Omega = -\sum P_j S_{ij} \vec{n}_{ij}$ , где  $P_j = -K_j (\Omega_j - \Omega_j^0) / \Omega_j^0$ ,  $S_{ij}$  — площадь контакта автоматов  $i$  и  $j$ , а  $\vec{n}_{ij}$  — единичный вектор направления, проведенного из центра автомата  $i$  к центру автомата  $j$ . Удельная сила сопротивления формоизменению при центральном взаимодействии в линейном случае определится выражением  $p_{ij}^e = -2G_i (\xi_{ij} - \bar{\xi}_i)$ , где  $G_i$  — модуль сдвига материала автомата  $i$ . Кроме потенциальных сил взаимодействия в

$$\frac{\Omega_i - \Omega_i^0}{\Omega_i^0} = \frac{\sum_{k=0}^N \Delta q_{ik} S_{ik}}{\Omega_i^0} = D \frac{\sum_{k=0}^N \xi_{ik}}{N} = D \bar{\xi}_i \quad (2)$$

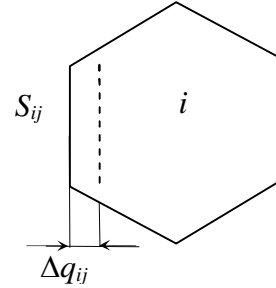


Рис. 1. Схема вычисления изменения объема автомата

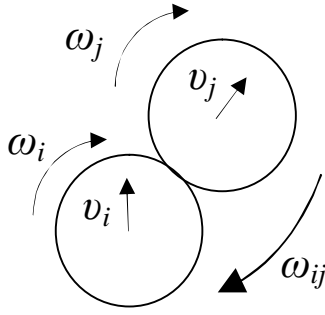


Рис. 2. Вращение автоматов

методе МСА используются диссипативные силы, которые определяются вязкостью материала  $\eta_{ij}$  и относительной скоростью автоматов пары. В линейном приближении для вязкой силы центрального взаимодействия имеем  $p_{ij}^v = \eta_{ij}(\vec{v}_j - \vec{v}_i)\vec{n}_{ij}/(q_{ij} + q_{ji})$ .

При определении сдвиговой деформации кроме тангенциальной составляющей трансляционного движения необходимо учитывать вращение автоматов. При движении пары автоматов без деформации как жесткого тела справедлива формула Эйлера  $\vec{v}_j - \vec{v}_i = \vec{\omega}_{ij} \times \vec{r}_{ij}$  (рис. 2). Умножая ее векторно слева на  $\vec{r}_{ij}$  можно получить выражение для скорости вращения пары как целого:

$$\vec{\omega}_{ij} = \vec{r}_{ij} \times (\vec{v}_j - \vec{v}_i) / r_{ij}^2 = \vec{n}_{ij} \times (\vec{v}_j - \vec{v}_i) / r_{ij}. \quad (3)$$

Отсюда следует, что скорость сдвиговой деформации определится разностью скорости вращения пары и автомата:

$$\vec{\omega}_{ij}^{sh} = \vec{V}_{ij}^T / q_{ij} = q_{ij}(\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times \vec{n}_{ij} / q_{ij} = (\vec{\omega}_{ij} - \vec{\omega}_i) \times \vec{n}_{ij}. \quad (4)$$

Сдвиговая деформация  $\gamma_{ij}$  находится интегрированием выражения (4), т.е. при расчетах она вычисляется через соответствующие приращения. Сила сопротивления сдвиговой деформации в линейном случае выражается формулой  $\vec{f}_{ij}^e = -(G_i \vec{\gamma}_{ij} + G_j \vec{\gamma}_{ji}) \times \vec{n}_{ij}$ .

Из анализа выражения (4) следует, что эта сила не препятствует деформациям сопряженного поворачивания («изгиба») и кручения автоматов в паре. В расчетах удобно рассматривать их не по отдельности, а вычислять суммарный момент сил сопротивления этим деформациям в виде

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

Тангенциальная сила вязкого трения определяется величиной суммарной скорости тангенциального смещения в точке контакта пары автоматов  $i$  и  $j$

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

по формуле

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

Применение формализма бистабильных автоматов к паре подвижных клеточных автоматов позволяет выделить два устойчивых состояния пар: связанные (когда соседние автоматы принадлежат одному телу) и несвязанные (когда автоматы пары принадлежат разным телам или фрагментам разрушенного материала). В простейшем случае в качестве критерия перехода пары из состояния связанной к состоянию несвязанной (т.е. критерия разрушения в среде подвижных клеточных автоматов) может быть принято превышение параметром перекрытия  $h_{ij}$  и/или разворота  $\vec{\theta}_j - \vec{\theta}_i$  некоторого порогового значения (рис. 3). В этом случае критерий разрушения принимает вид, аналогичный деформацион-



ному критерию в механике деформируемого твердого тела. Для сложных сред критерий перехода может определяться более сложными обобщенными параметрами, в частности, на основе интенсивности напряжений.

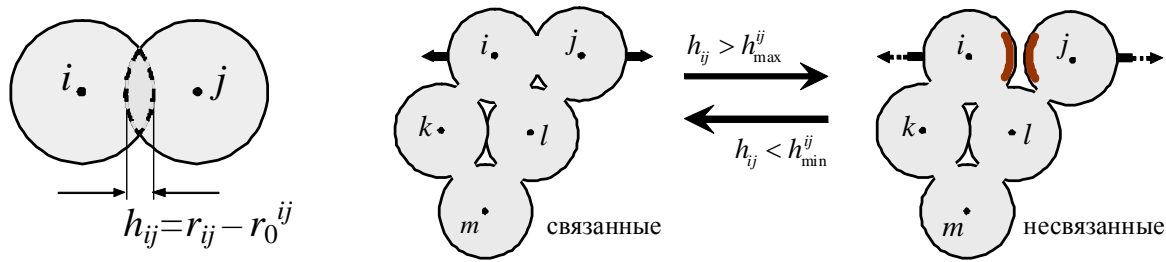


Рис. 3. Понятие межавтоматного перекрытия  $h_{ij}$  и переходы между состояниями пары, описывающие процессы разрушения и заживления трещин

При стремлении размера подвижных клеточных автоматов к нулю модельная среда будет описывать некий континуум. Анализ соответствующих соотношений показывает, что в случае линейных функций отклика этот континуум описывается законом Гука. Это дает основание для совместного использования метода МСА и численных методов континуальной механики. Такой комбинированный подход позволяет объединить преимущества каждого из методов для задач, например, трения, в которых можно априори выделить области локализованных деформаций с перемешиванием вещества, описываемые методом МСА, а также протяженные области малых упругих деформаций, где численно решаются уравнения континуума. Следует отметить, что основным недостатком метода частиц, в том числе подвижных клеточных автоматов, является повышенное требование к вычислительным ресурсам вследствие необходимости пересчета окружающих элементов для каждой частицы.

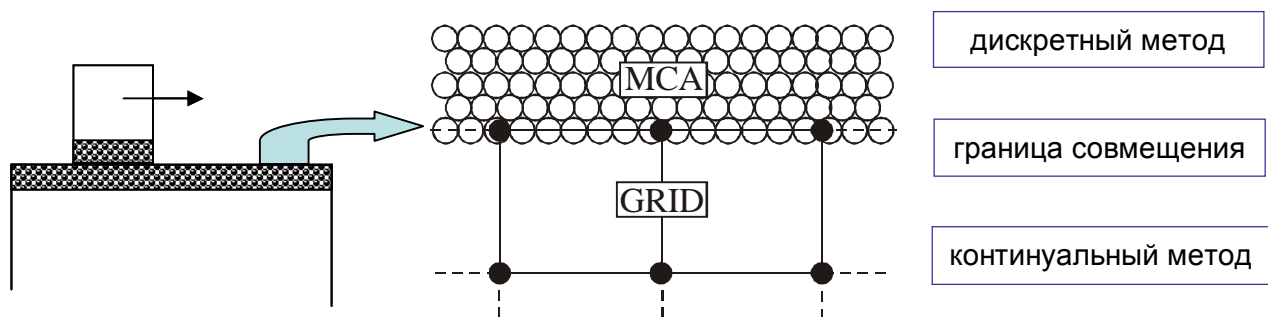


Рис. 4. Принцип совмещения метода МСА с континуальным методом

Сущность совмещенного дискретно-континуального подхода представлена на рис. 4. Центры автоматов, лежащих на границе совмещения, предполагаются жестко связанными с граничными ребрами сетки. В ходе расчета со стороны сеточного метода (главной программы) в дискретный метод передаются скорости и положения узлов-автоматов, а возвращаются силы, действующие со стороны МСА-области на узлы сетки, лежащие на границе совмещения. Двумерная программа метода МСА объединялась с программой, реализующей ме-

тод конечных разностей (метод Уилкинса).

Во втором разделе изложены результаты частотного и частотно временного анализа упругих волн, возникающих при контактном взаимодействии.

Рассмотрены особенности частотного анализа упругих волн, реализующихся в материалах в результате различных динамических воздействий, при моделировании методом подвижных клеточных автоматов. В частности, проанализированы Фурье-спектры сигналов, соответствующих временным зависимостям (регистрациям) таких величин, как компоненты скорости, давление и интенсивность напряжений в определенных точках тела при точечном воздействии на его свободной поверхности. Частотные спектры полученных регистраций сравнивались с характеристиками исходных воздействий, как импульсных, так и периодических во времени. Показано, что даже при многократном отражении упругих волн в конечных образцах основные частоты регистрируемых сигналов достаточно четко отражают характеристики внешнего источника. Эти результаты говорят о возможности изучения сложных процессов, например, трения, в которых имеется множество источников упругих волн, действующих непрерывно, на основе анализа рассмотренных сигналов, поскольку такой анализ позволяет выявлять основную частоту, соответствующую природе этих процессов.

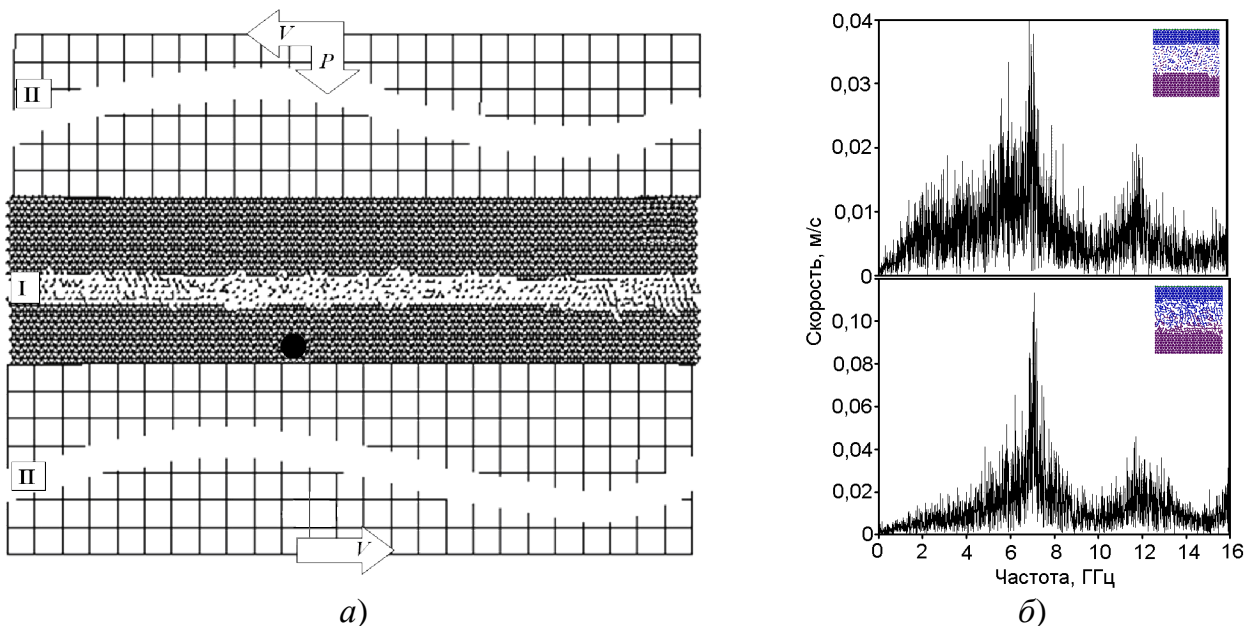


Рис. 5. Структура со схемой нагружения моделируемого пятна контакта при трении (а) и спектры регистраций вертикальной составляющей скорости (б) в точке, показанной черным кружком на рисунке а, при различных критериях переключения пар в состояние «связанные»

Исследованы закономерности генерации упругих волн в зоне модельного трибологического контакта. Моделирование пятна контакта при трении стальных образцов производилось на основе дискретно-континуального подхода.

Структура расчетной области и используемая схема нагружения представлены на рис. 5. Здесь область I моделировалась методом МСА, а область II — сеточным методом. На внешних поверхностях областей задавалась горизонтальная скорость  $V$ , постепенно наращиваемая от 0 до 10 м/с. Одновременно на верхнюю поверхность действовало давление  $P_m=127,5$  МПа. Нижняя поверхность была зафиксирована по оси  $Y$ . На вертикальных границах областей в горизонтальном направлении задавались периодические граничные условия. Диаметр автомата был выбран равным 2,5 нм, шаг сетки — 10 нм.

Анализ частотного спектра регистраций компонент скорости ( $V_x$ ,  $V_y$ ), давления ( $P$ ) и интенсивности напряжений ( $I$ ) в определенных точках дискретной области модели показал, что наиболее интенсивные пики соответствуют собственным частотам системы. Небольшой размытый пик на спектрах вертикальной составляющей скорости и интенсивности напряжений соответствовал среднему времени существования связанных пар автоматов в «квазижидком» слое, разделяющем взаимодействующие поверхности. Положение этого пика изменяется при варьировании параметров, отвечающих за переход пар из состояния «несвязанные» в состояние «связанные» (рис. 5,б). Соответствующую этому пику частоту можно интерпретировать как характеристику колебательного движения на микроуровне в режиме «stick-slip».

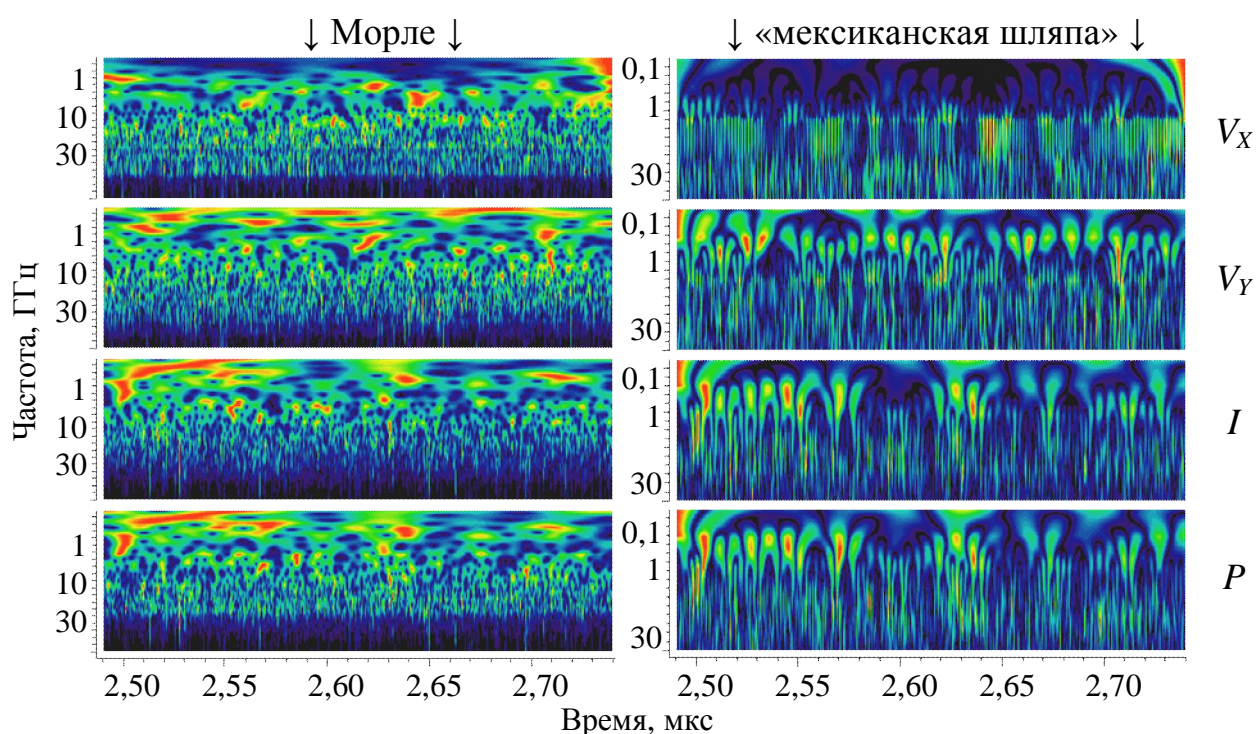


Рис. 6. Вейвлет-изображения регистраций упругих волн в модельной паре трения

Размытость пиков на спектрах, а также динамический характер взаимодействующих поверхностей побудили провести частотно-временной анализ соответствующих регистраций с помощью вейвлет-преобразований (рис. 6). В ка-

честве вейвлетов использовались функции Морле и «мексиканская шляпа». Из рис. 6 следует, что упругие волны в модельной паре трения являются частотно- и амплитудно-модулированными. Было показано, что, несмотря на, казалось бы, случайный характер элементарных актов отделения «частиц износа» и их последующего «приваривания» в зоне трения, изменение профиля трущихся поверхностей приводит к изменению характерных размеров блоков и, следовательно, частотной модуляции возникающих упругих волн. Амплитудная модуляция регистрируемых сигналов может быть объяснена соответствующими колебаниями силы взаимодействия верхнего и нижнего блоков.

Для идентификации остальных пиков был проведен анализ профиля поверхности, разделяющей «квазижидкий» слой и «твердую» часть образцов. Показано, что периодичность в профилях взаимодействующих поверхностей (рис. 7) проявляется в соответствующих частотах упругих волн, возникающих при их относительном перемещении и соответствующих неидентифицированным ранее пикам на частотном спектре упругих волн в модельной системе.

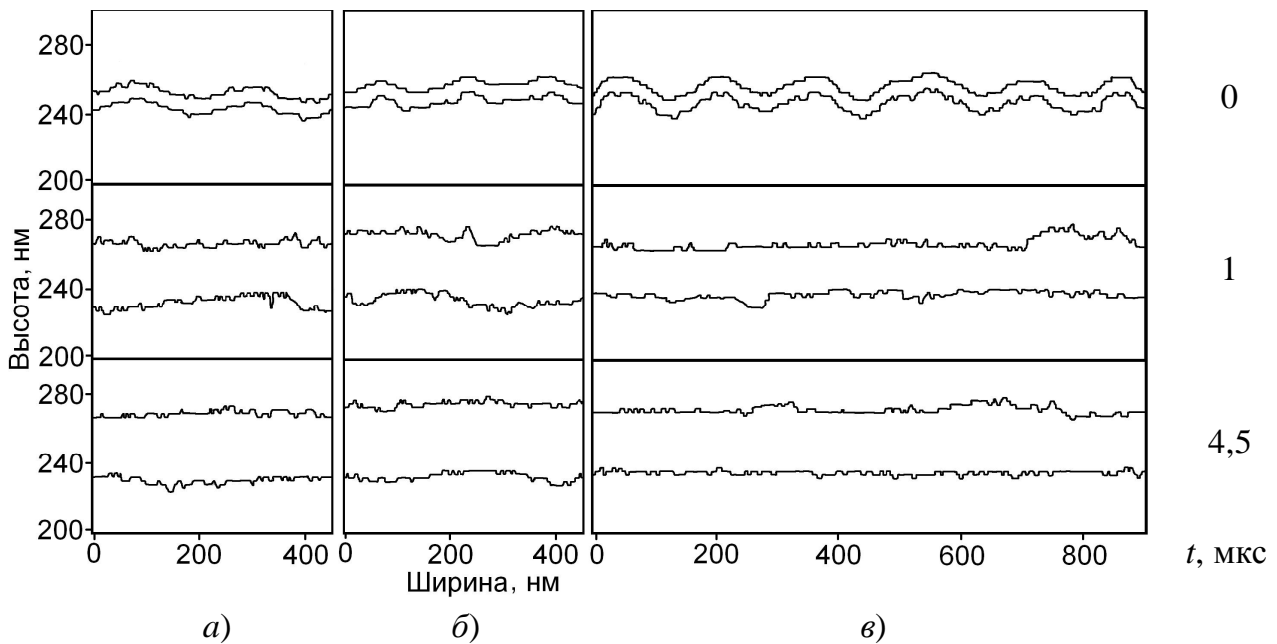


Рис. 7. Профили поверхностей верхнего и нижнего блоков для различных образцов *a – в* в различные моменты времени *t*

В заключение раздела приведены результаты частотного и частотно-временного анализа экспериментальных данных по акустической эмиссии в звуковом диапазоне при трении скольжения стальных образцов. Исследуемый сигнал содержит последовательность квазипериодических всплесков интенсивности колебаний. Для детального исследования динамики процесса кроме обычного преобразования Фурье этого сигнала были также построены его оконное преобразование Фурье и вейвлет-преобразование с базовой функцией Морле (рис. 8). Частотно-временной анализ показывает, что всплески интенсивности акустических колебаний происходят на фоне некоторого постоянного



сигнала, который имеет однородную структуру. Воспользовавшись связью между собственными частотами и размерами резонаторов можно заключить, что фоновый сигнал соответствует колебаниям деталей здания, а указанные всплески интенсивности соответствуют колебаниям таких элементов экспериментальной установки, как держатель втулки и вал с контртелом. Учитывая, что частицы износа имеют характерные размеры 3–50 мкм, а скорость относительного движения в точке контакта есть 0,067 м/с, то можно заключить, что возбуждение собственных колебаний упомянутых элементов установки вызвано процессами формирования частиц износа.

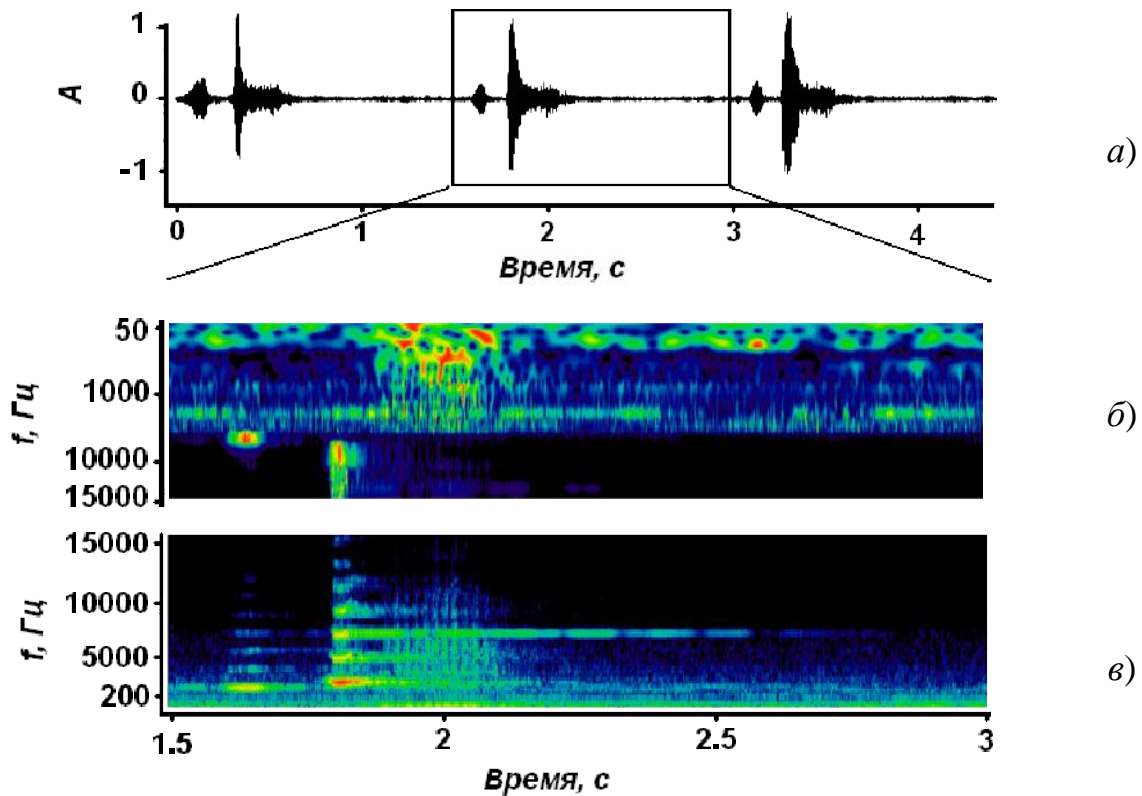


Рис. 8. Звуковой сигнал (а), его вейвлет-преобразование (б) и оконное преобразование Фурье (в)

Из полученных результатов следует, что некоторые закономерности процесса изнашивания могут быть изучены на основе анализа соответствующих акустических спектров.

В третьем разделе рассмотрено развитие метода подвижных клеточных автоматов для решения трехмерных задач. Изложены особенности расчета сил межавтоматного взаимодействия и параметров, зависящих от упаковки автоматов, в трехмерной постановке.

Далее рассмотрены два способа описания вращения при моделировании методом частиц: первый — с явным учетом поворотов, который ведет к увеличению размерности фазового пространства, а второй — опосредованный, то есть реализующийся как результат коллективного поведения элементов, состав-

ляющих модельную среду.

Для опосредованного учета вращения достаточно в качестве скорости вращения автомата принять среднюю скорость вращения пар соседей, с которыми он связан. В двумерном случае это сделать достаточно просто, поскольку поворот описывается скалярной величиной. Средняя скорость вращения определится простым выражением

$$\omega_i = \sum_{j=1}^N \omega_{ij} / N,$$

где  $\omega_{ij}$  — скорость вращения пары автоматов  $i$ – $j$ , определяемая по формуле (3), а  $N$  — количество взаимодействующих соседей.

В трехмерном случае повороты описываются ортогональными тензорами или псевдовекторами, 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  $i$  с трансляционной скоростью  $\vec{v}_{ij}$ . С таким движением можно сопоставить вращение вокруг точки  $i$  некоторого твердого тела, образуемого  $j$ -ми точками. Реальное движение каждой точки  $j$  будет складываться из среднего движения как твердого тела и деформации этого тела. Нужно определить скорость вращения такого твердого тела. Его можно найти, приравнявая кинетический момент системы точек

$$K = \sum_{j=1}^N \vec{r}_j \times m_j \vec{v}_j,$$

и кинетический момент твердого тела при его вращении вокруг оси, заданной единичным вектором  $\vec{n}_\omega$ , с угловой скоростью  $\omega$

$$K = \sum_j m_j v_j \rho_j = \sum_j m_j \rho_j^2 \omega = J \omega,$$

где  $\rho_j = |\vec{r}_j \times \vec{n}_\omega|$  — расстояние от оси вращения до точки  $j$ . Учитывая, что массы всех автоматов одинаковы, искомая средняя скорость вращения окружения автомата в трехмерном случае запишется как

$$\vec{\omega}_i = \frac{\sum_{j=1}^N \vec{r}_{ij} \times \vec{v}_{ij}}{\sum_{j=1}^N |\vec{r}_{ij} \times \vec{n}_\omega|^2}.$$

где  $\vec{n}_\omega = \sum_{j=1}^N \vec{\omega}_{ij} / |\sum_{j=1}^N \vec{\omega}_{ij}|$  — единичный вектор направления искомого вращения.

Расчеты с таким учетом вращений показали, что в этом случае мы получаем точно такое же поведение, 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 (о распространении упругих волн в упругом полупространстве от точечного источника на его поверхности) не выявили значительных количественных различий. Недостатком опосредованного способа является неоднозначность при пересчете поворота как среднего в случае разрыва одной или нескольких связей или образования новой

связи между частицами, которые могут происходить при интенсивных деформациях.

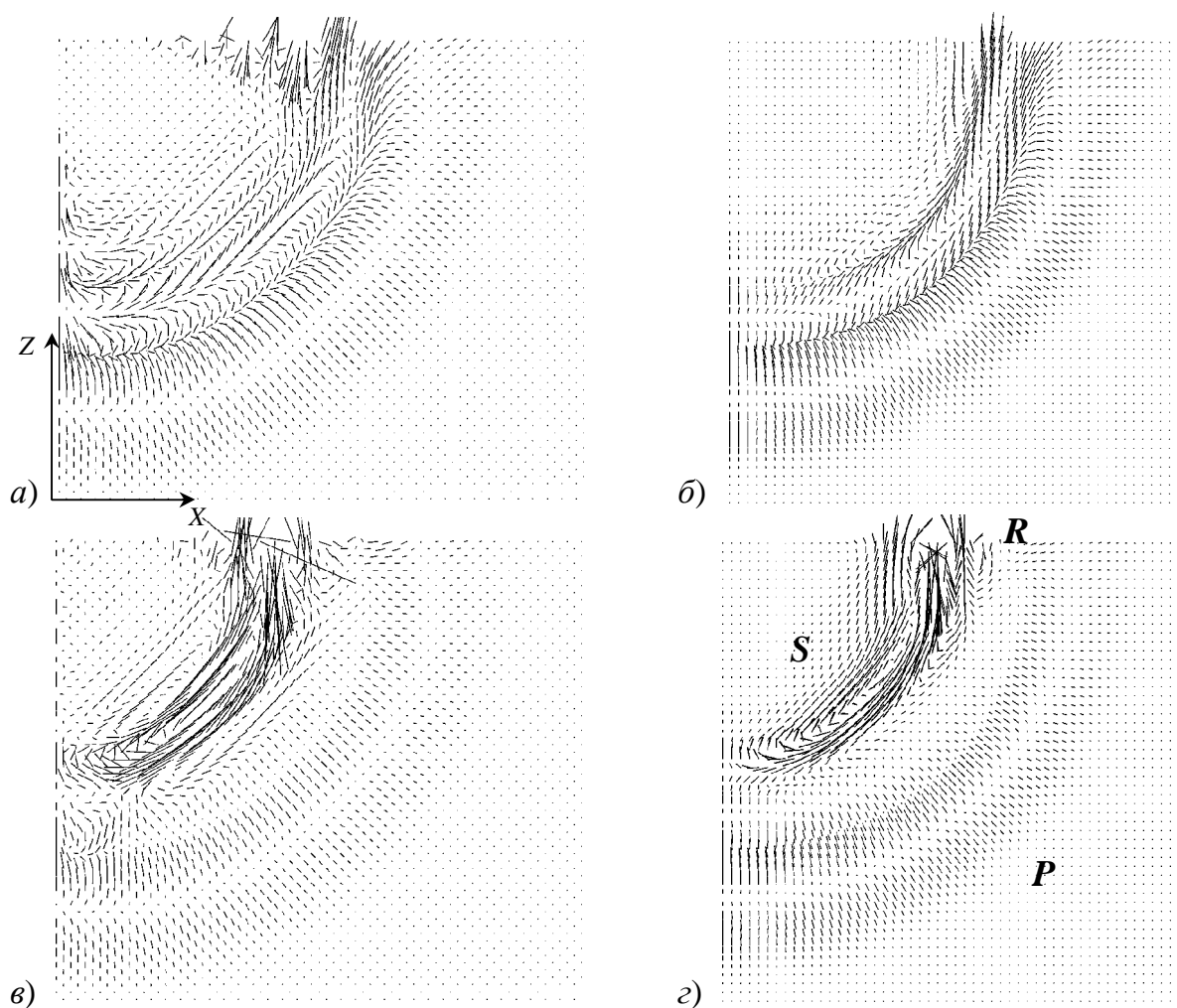


Рис. 9. Поле скоростей подвижных клеточных автоматов при решении задачи Лэмба для различных вариантов модели и упаковок автоматов: а) ГЦК упаковка без учета вращения, б) кубическая упаковка без учета вращения, в) ГЦК упаковка с учетом вращения, г) кубическая упаковка с учетом вращения элементов

Поскольку в трехмерных расчетах важное значение имеет оптимизация вычислительных ресурсов, в том числе за счет экономии на вычислении несущественных параметров, то далее рассмотрен вопрос о важности учета вращения при моделировании методом подвижных клеточных автоматов. Для этого проанализированы результаты по распространению упругих волн в задаче Лэмба, полученные с учетом вращения элементов и без него (рис. 9). В силу симметрии задачи рассматривалась расчетная область, представляющая собой 1/4 куба. На плоскостях  $X=0$  и  $Y=0$  задавались условия симметрии, остальные грани куба считались свободными. Импульс прикладывался в точке начала координат в виде «купола» синусоиды для вертикальной составляющей скорости. Все результаты на рис. 10 представлены в плоскости  $Y=0$ .

Проведенные расчеты показывают, что результаты, полученные без учета

вращения, зависят от используемой упаковки автоматов. Так, в случае кубической упаковки без учета вращений волна Релея  $R$  полностью отсутствует, а сдвиговая волна  $S$  движется непосредственно за продольной  $P$  с такой же скоростью, что является качественно неверным результатом (рис. 9,б). Заметим, что плотная упаковка обеспечивает качественно правильные результаты, но отличающиеся количественно (рис. 9,а). Следовательно, учет поворота либо как самостоятельной степени свободы автоматов, либо через вращение окружения обязателен для корректного описания классической сплошной среды 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.

Далее проведены результаты 3D моделирования скольжения наноскопического контртела по керамическому покрытию (рис. 10). Изучалась возможность оценки плотности нанодефектов в покрытии на основе спектрального анализа временной зависимости силы сопротивления трению скольжения такого контртела. Показано, что основные пики на спектрах соответствуют собственным частотам образца. Кроме того, на них присутствуют пики, соответствующие характерному размеру искусственной шероховатости контактирующих тел (т.е. размеру автомата, равному 3 нм). В случае присутствия в покрытии периодически расположенных нанопор шириной 12 нм (рис. 10,б), в низкочастотной области спектра появляются пики, соответствующие расстоянию между нанопорами. Выявленный эффект, очевидно, связан с прогибом поверхности при прохождении контртела над порой. Таким образом, было показано, что трибоспектральный анализ позволяет сделать оценку расстояния между нанопорами в покрытиях.

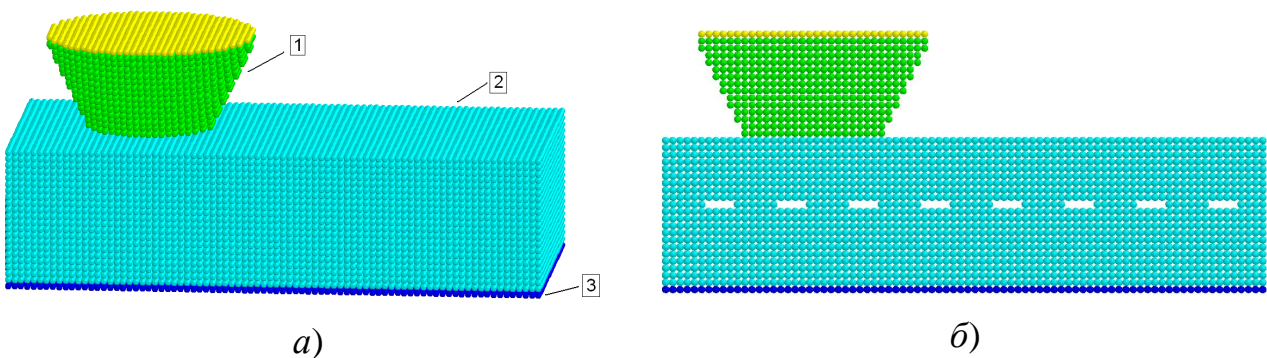


Рис. 10. Образец для изучения скольжения контртела (1) по керамическому покрытию (2) на стальной подложке (3): а) – общий вид; б) – сечение при наличии нанопор в покрытии

В заключении приводятся основные результаты и выводы.



## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

- 1) Метод подвижных клеточных автоматов развит для моделирования механического поведения материалов в трехмерной постановке с многочастичным учетом тангенциального взаимодействия в рамках единой схемы для 2D и 3D задач.
- 2) Показано, что для корректного описания процессов распространения упругих волн в твердых телах методом подвижных клеточных автоматов необходимо учитывать поворотные моды деформации.
- 3) В рамках метода подвижных клеточных автоматов разработана методика изучения особенностей распространения упругих волн в твердом теле от различных источников на его поверхности на основе частотного анализа временных зависимостей компонент скорости, интенсивности напряжений и давления.
- 4) В результате численного решения динамических контактных задач показано, что возникающие при относительном движении твердых тел упругие волны являются частотно- и амплитудно-модулированными, что открывает возможности применения средств частотно-временного анализа экспериментальных акустических сигналов для изучения особенностей деформации и разрушения в зонах контакта.
- 5) Использование частотно-временного анализа экспериментальных данных по регистрации акустических колебаний, возникающих при трении скольжения, показало, что основные частоты квазипериодических всплесков интенсивности этого звука связаны с процессом изнашивания, при движении контактирующих поверхностей и усиливаются за счет резонанса элементов экспериментальной установки.
- 6) На основе решения трехмерных задач исследованы закономерности частотного спектра изменения силы сопротивления движению наноскопического контртела по дефектной поверхности, при этом показано, что высокочастотные пики соответствуют собственным частотам системы (автоколебания), а низкочастотные – особенностям структуры поверхностного слоя (искусственная шероховатость) и внутренним повреждениям (нанопорам).

Основное содержание работы изложено в 24 публикациях, из которых важнейшими являются следующие.

### **Статьи в журналах, входящих в перечень ВАК по специальности**

1. Смолин А.Ю., Роман Н.В., Добрынин С.А., Псахье С.Г. О вращательном движении в методе подвижных клеточных автоматов // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т.12. – №2. – С. 17–22.
2. Смолин А.Ю., Добрынин С.А., Псахье С.Г. Анализ упругих волн, генерируемых при контактном взаимодействии. Компьютерное моделирование //

Физическая мезомеханика. – 2009. – Т.12. – №3 – С. 79–88.

3. Смолин А.Ю., Добрынин С.А., Псахье С.Г. О возможности изучения деформационных процессов в поверхностном слое при трении по акустическим спектрам // ПЖТФ. – 2009. – Т.35. – №24 – С. 1–11.
4. Добрынин С. А., Коростелев С.Ю., Смолин А.Ю., Псахье С.Г. О реализации дискретно континуального подхода на многопроцессорных вычислительных системах // Известия вузов. Физика. – 2009. – Т.52. – №12/2. – С. 42–46.

#### **Статьи в журналах, входящих в перечень ВАК**

5. Смолин А.Ю., Добрынин С.А., Псахье С.Г. Факторы, определяющие генерацию упругих волн при трении. Моделирование на основе дискретно-континуального подхода // Известия Томского политехнического университета. – 2009. – Т.314. – №2. – С. 76–82.
6. Смолин А.Ю., Добрынин С.А., Псахье С.Г. Частотно-временной анализ упругих волн в модельной паре трения // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика – 2009. – Т.5. – №1. – С. 96–111.

#### **Статьи в материалах конференций**

7. Smolin A.Yu., Dobrynin S.A. Identification of elastic waves generated in friction zone. Computer simulation / Proceedings of the XXXVI Summer School “Advanced problems in mechanics (APM’ 2008)”, St. Petersburg (Repino) July 6–10, 2008; Ed.: D.A. Indeitsev, A.M. Krivtsov – St. Petersburg: Institute for problems in mechanical engineering, 2008. – P. 614–620.
8. Смолин А.Ю., Добрынин С.А. Упругие волны как источник информации о процессах в зоне трения // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики. Материалы VI всероссийской конференции, посвященной 130-летию Томского государственного университета и 40-летию НИИ прикладной математики и механики; Томск, 30 сентября – 2 октября 2008. – Томск: Изд-во ТГУ, 2008. – С. 296–297.
9. S.A. Dobrynin, A.Yu. Smolin, , Ig.S. Konovalenko Peculiarities determining generation of elastic waves in friction. Computer simulation using discrete-continual approach // Proceedings of the XXXVI Summer School “Advanced problems in mechanics (APM’ 2009)”, St. Petersburg (Repino) June 30 – July 5, 2009; Editors: D. A. Indeitsev, A. M. Krivtsov – St. Petersburg: Institute for problems in mechanical engineering, 2009. – P. 183–191.

#### **Регистрационное свидетельство**

10. Программа для моделирования материалов в дискретно континуальном подходе «FEM+МСА»: Номер государственной регистрации в ОФАП: 50208802297 / Смолин А.Ю., Зелепугин С.А., Добрынин С.А.; заявитель и организация-разработчик ГОУ ВПО Томский государственный университет. – зарег. 28.11.08; свидетельство ОФАП № 11826 от 01.12.08.



Подписано в печать 23 декабря 2009 г.  
Формат 60×84/16. Гарнитура Таймс. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

---

Отпечатано в Учреждении Российской академии наук  
Институте физики прочности и материаловедения СО РАН  
634021, г. Томск, пр. Академический, 2/4