

1 Подходы, используемые при исследовании контактного взаимодействия твердых тел

1.1 Основные закономерности механики контактного взаимодействия

Взаимодействие твердых тел при трении происходит за счет касания микронеровностей, совокупность которых составляет понятие шероховатости поверхности. На рис. 1.1 показаны основные характеристики геометрии шероховатых поверхностей: шероховатость с максимальной высотой профиля R_{\max} , волнистость с максимальной высотой волны $R_{W\max}$ и макроотклонения от горизонтальной базовой плоскости с размером δ [21].

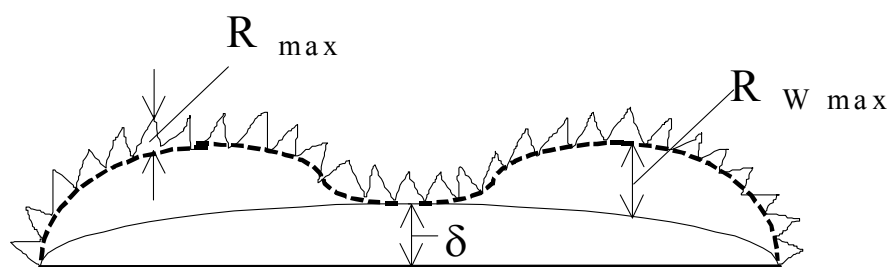


Рисунок 1.1 – Основные характеристики геометрии шероховатых поверхностей

При движении соприкасающихся поверхностей происходит разрушение и образование мостиков адгезионного контакта (микросварка) в пятнах касания, что вызывает динамические возбуждения высокой частоты на начальных стадиях трения и при малых нагрузках [22]. Изнашивание при этом концентрируется в тех пятнах касания, где адгезионное взаимодействие материалов пары трения формирует микротрещины и частицы износа под действием локальных напряжений.

По мере приработки поверхностного слоя число пятен контакта увеличивается, и начиная с некоторой плотности возможно согласованное взаимодействие (схватывание [23]) контактов на мезомасштабном уровне. В

свою очередь, контртело захватывает материал, прилегающий к такому мезоконтакту, и материал деформируется упруго до тех пор, пока напряжения не достигнут величины сцепления. При достижении такого предельного напряжения дальнейшее сцепление невозможно и происходит отрыв контртела. После этого в течение некоторого времени наблюдается релаксация напряжений. Величина этого времени зависит от упругопластических свойств материала [24, 25]. В общем случае вышеописанный процесс можно представить как возбуждение колебаний под влиянием повторяющихся ударов. При достаточной силе механического импульса оно ведет к автоколебаниям некоторых деталей узла трения, частота которых определяется собственной частотой таких деталей—«резонаторов». Заметим, что при увеличении нагрузки трибосопряжение демонстрирует аналогичное поведение.

Таким образом, вибрация и генерация акустических сигналов – это неотъемлемые процессы, которыми сопровождается трение [26]. Более того, упругие возбуждения не просто сопровождают процессы трения, но и сами могут влиять на взаимодействие контактирующих тел, например, вызывать деградацию структуры. В частности это продемонстрировано в работе [27].

Как правило, во время трения поверхностей значительная трансформация материала наблюдается вблизи контакта. Происходит образование одного или нескольких приповерхностных слоев различной толщины, свойства которых отличаются от свойств основного материала [28–42]. Следует отметить, что характеристики и поведение системы трения определяются именно такими поверхностными слоями. А толщина, состав, структура и свойства модифицированных слоев задаются характеристиками первоначального материала, условиями нагружения и внешней средой, в которой происходит процесс трения. В работах Д. Ригина [33, 43] предлагается рассматривать тончайшие поверхностные слои как некоторое третье тело. При этом материал, из которого состоит данное тело, находится в состоянии пластического течения. Важно заметить, что это тело характеризуется сложностью структуры, которая модифицируется с течением времени. Оно

может обладать свойствами как жидкой, так и кристаллической фаз одновременно. То есть состояние такого тела представляет собой нечто среднее между кристаллическим и жидким состояниями. В.И. Владимиров [34] дает ему название – возбужденное. Дело в том, что переход в возбужденное состояние вызывает аномальный массоперенос и сверхпластичность. С точки зрения термодинамики, образование слоя измененного материала вблизи поверхности – это процесс самоорганизации с целью создания диссипативной системы, которая обеспечивает максимально эффективное рассеивание прикладываемой энергии. Среди актуальных задач современной трибологии важное место отводится исследованию причин, механизмов и кинетики формирования поверхностного слоя во время трения. Важно понимать, что решение этой проблемы даст большие возможности в разработке новых технологий, позволяющих формировать поверхностные слои с требуемыми характеристиками как в процессе изготовления, так и в процессе эксплуатации. А это, в свою очередь, даст возможность управлять процессами, протекающими на контакте, а вместе с ними фрикционными характеристиками и износостойкостью [44, 45].

Установлено, что динамическое равновесие процессов формирования и разрушения тонкого поверхностного слоя вторичных структур – это механизм, который контролирует процесс изнашивания [45]. В частности, этим обстоятельством объясняется периодическое изменение параметров изнашивания кристаллических материалов при сухом трении [46, 47]. Таким образом, число отслаивающихся частиц, прочностные свойства поверхностного слоя, коэффициент трения, сигналы акустической эмиссии подвержены периодическому изменению. Заметим, что это связано с процессами пластического деформирования поверхностного слоя и его разрушением [48]. В настоящее время теория послойного износа – это самая распространенная концепция, объясняющая вышеописанные явления периодичности и дающая обоснование большинству закономерностей, наблюдаемых экспериментально [49]. В сжатом виде суть данной теории состоит в следующем. При

многократном скольжении металла по металлу дефекты кристаллической решетки накапливаются не у поверхности, а на некоторой глубине. Со временем это ведет к появлению пустот и трещин, расположенных параллельно поверхности. При достижении трещинами критической величины поверхностный слой металла срезается в виде листообразной частицы износа. Затем то же самое происходит с обнаженными нижележащими слоями материала. То есть накопление дефектов и отделение частиц износа на поверхности осуществляются периодически. Нужно отметить, что этот случай возможен в области чистой, или многоцикловой усталости при условии, что амплитуды напряжения ниже некоторой критической величины. Если же напряжения выше предельных, то отмечается повышенный износ с хаотическим образованием частиц износа [44].

Специфический способ фрикционного контактного нагружения материала – одна из причин образования поверхностного слоя при трении. Повторим, что трению присущ дискретный, стохастический характер взаимодействия, в том числе и для поверхностей, контактирующих в первый раз [50–57]. У таких поверхностей это происходит потому, что рельеф их изначально неидеален. А у приработанных поверхностей, соответственно, – из-за микрорельефа (равновесной шероховатости), который образуется в процессе трения. Поэтому фактически твердые тела контактируют только в отдельных зонах – пятнах касания. Заметим, что эти пятна образуются при взаимодействии вершин неровностей с наименьшей суммой высот. Множество таких микроконтактных зон формирует полную фактическую площадь контакта (ФПК) (рис. 1.2) [58].

В реальности ФПК занимает от сотых долей процента до десятков процентов номинальной площади контакта взаимодействующих материалов. Эта цифра зависит от физико-механических свойств этих материалов, от номинальной нагрузки и шероховатости поверхностей. Например, в металлах ФПК составляет примерно 1–10% номинальной площади контакта [54, 55].

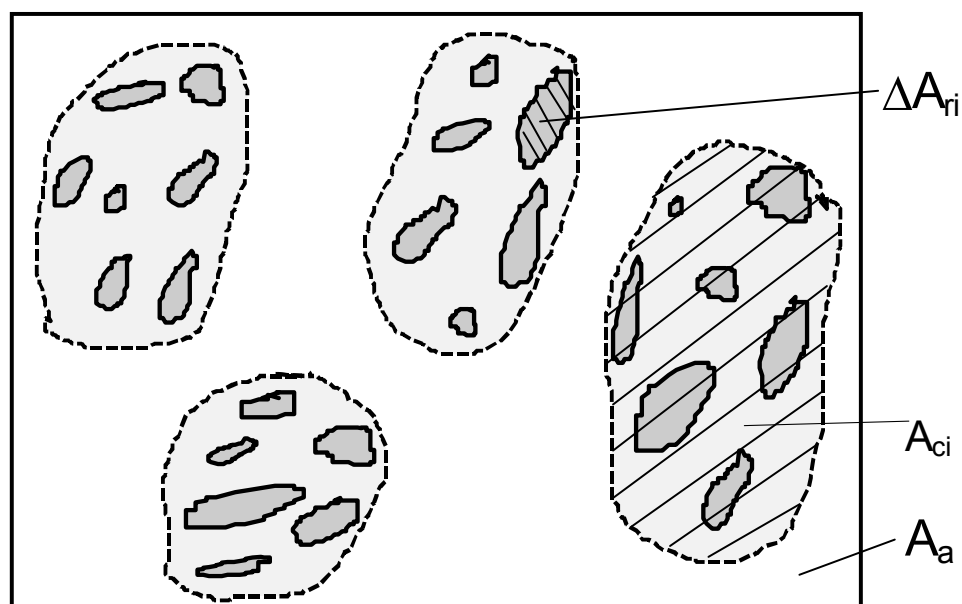


Рисунок 1.2 – Структура площади реального контакта двух шероховатых поверхностей. ΔA_{ri} – фактическая площадь единичного пятна касания, A_{ci} – контурная площадка контакта, A_a – номинальная площадь контакта

Приведем формулу для оценки ФПК при пластическом контакте, которая была предложена Боуденом и Тейбором [28]:

$$A_r = N/q_T, \quad (1.1)$$

здесь A_r – фактическая площадь контакта, N – нормальная нагрузка, q_T – напряжение текучести (обычно в качестве q_T берется значение твердости по Бринеллю [54]). Нужно сказать, что с помощью данной формулы получаются достаточно правильные результаты для металлических поверхностей с грубой и средней шероховатостью.

Из формулы (1.1) вытекает очень важное заключение. Принимая во внимание то, что обычно значение ФПК на 1–2 порядка меньше номинальной площади контакта, видим, что даже давления, в 10–100 раз меньшие, чем предел текучести материала, могут приводить к пластическим деформациям на пятнах касания. Формула (1.1) также говорит о том, что q_T является средним давлением на контакте. При пластическом контакте оно предполагается постоянным и равным твердости материала, что соответствует современным взглядам о контакте шероховатых поверхностей. Реальное давление, которое

примерно равно пределу текучести, практически не зависит от приложенной нагрузки. Таким образом, в результате мы видим, что именно механические свойства поверхностных слоев и микрогеометрия поверхностей, а не номинальное давление, являются параметрами, от которых зависит протекание различных процессов в области контакта. При этом последние, в свою очередь, определяют величину ФПК. С возрастанием номинального давления причиной увеличения площади фактического контакта является вхождение во взаимодействие новых неровностей. А средняя площадь контакта единичной неровности является почти постоянной [54, 55].

Размер ФПК, форма и величина единичных пятен касания задают напряженно-деформированное состояние в поверхностных слоях взаимодействующих тел, тем самым влияя на ход трения и изнашивания. Также подчеркнем, что толщина слоя материала с неоднородным распределением напряжений и деформаций тоже находится в зависимости от размера пятен контакта и от расстояния между ними. В этом слое случайным образом происходят пульсации напряжений большой амплитуды, что обусловлено стохастичностью микрорельефа [44].

Обратим внимание на то, что распределение давления на контактной поверхности неоднородно. Это обусловлено тем, что шероховатые поверхности взаимодействуют на отдельных, наиболее выдающихся неровностях, что можно видеть на рис. 1.3 [59]. Примерно на половине пятен касания величина давления достигает твердости более мягкого из взаимодействующих материалов. На границе раздела основного материала с покрытием, на некотором расстоянии от поверхности, напряжения значительно уменьшаются и остаются упругими под всеми пятнами касания. Далее по мере удаления от поверхности напряжения постепенно выравниваются. В результате на некоторой глубине их распределение становится почти однородным. Как правило, толщина слоя с неоднородным распределением напряжений при нормальных условиях внешнего трения равна примерно 100 мкм. Такую оценку дает И.В. Крагельский. Напряжения в нижележащих слоях в 100–1000 раз

меньше [50–52]. Эта оценка подтверждается экспериментами. Согласно им толщина деформированного слоя насчитывает от нескольких десятков микрон до нескольких сотен микрон, а деформация может составлять от 10–15% [59] до 900–1000% [35].

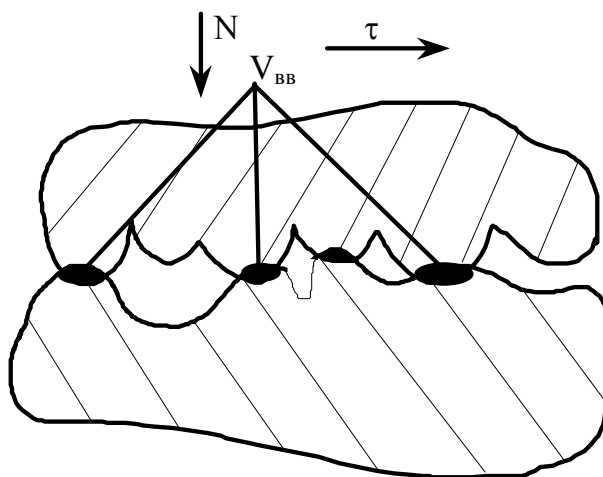


Рисунок 1.3 – Контакт шероховатых поверхностей. $V_{\text{вв}}$ – пятна касания,
 N – нормальная сила, τ – тангенциальная сила

Экспериментальные исследования демонстрируют, что структурное состояние поверхностного слоя также зависит от геометрии контакта [60]. Например, в результате действия контактных напряжений поверхностный слой приобретает ячеистую фрагментированную структуру. Это показывают исследования ОЦК-металлов. Нужно отметить, что в данной структуре изменения внешних условий нагружения квазиупруго воспринимаются границами фрагментов. Благодаря структурной приспособляемости фрагменты реагируют на усиление внешних приложенных напряжений сокращением в размерах [29, 61]. Это, в свою очередь, увеличивает долю границ в объеме материала, которые и воспринимают увеличившуюся нагрузку. А внешние приложенные напряжения находятся в зависимости от площади фактического касания, нагрузки, расстояния между пятнами контакта, их размера. То есть принимая во внимание только деформационную составляющую процесса трения уже можно сделать заключение, что

структурное состояние материала в поверхностном слое зависит от геометрических параметров контакта.

Главная причина повреждений узлов трения, как показывают исследования, – это износ. Тем не менее, вибрации – это явления, обладающие не менее разрушительным эффектом. Как указывалось выше, во время колебания элементов пар трения возникают акустические волны, создающие акустическое поле [44]. Последнее может быть весьма опасным для человека, особенно если колебания происходят в частотном диапазоне 4–30 Гц [2].

Нужно отметить, что трение скольжения всегда сопровождается упругими колебаниями. При пластической деформации, появлении трещин в поверхностном слое во время трения, отделении частиц износа и образовании адгезионного схватывания возникают колебания ультразвуковой частоты. Они представляют наибольший интерес для физики трения, так как зарегистрированные колебания позволяют оценить характер взаимодействия трущихся материалов. Например, экспериментально зафиксирована взаимосвязь между пиком акустической эмиссии ультразвуковой частоты и периодическим разрушением упрочненных слоев металла на поверхности трущихся тел [46]. Во время трения происходит периодическая смена этапов упрочнения поверхностного слоя металлов и его разрушения. При разрушении наблюдается усиление акустической эмиссии. Вследствие этого соответствие акустической эмиссии и характера трения может быть использовано как метод получения данных о состоянии поверхностей трения по частотному спектру и интенсивности ультразвукового сигнала.

Если же говорить о звуке, который создается узлом трения в пределах частот, воспринимаемых человеческими органами слуха, то весь практический интерес к нему в основном состоит лишь в поиске путей его устранения или уменьшения. Это обусловлено тем, что шум, генерируемый поверхностями трения, может вызвать сильный дискомфорт для человека.

Принято считать, что источником звука при трении являются фрикционные автоколебания. Известно, что последние также являются

причиной повышенного износа взаимодействующих тел, так как могут затруднять их равномерное движение. Анализ публикаций, посвященных исследованиям вибрации и акустической эмиссии при трении, говорит о том, что причиной автоколебаний является ниспадающая зависимость коэффициента трения при возрастании скорости скольжения [62–64]. Заметим, что различные примеры колебаний в сопряжениях, обусловленные такой зависимостью силы трения [53], подтверждают эти выводы. Однако они не объясняют, почему при коэффициенте трения ниже некоторой величины звук и вибрации отсутствуют. Теоретические вычисления обнаружили тот факт, что звук при трении может возникнуть даже при стабильном коэффициенте трения, однако последний должен при этом быть больше некоторой величины [65]. Ниже этой величины звук не возникает, но даже ее небольшое превышение приводит к генерации сильного звука. Изучение возникновения звука при фреттинге привело к заключению, что с увеличением износа возрастает уровень звука, то есть между ними существует прямая зависимость [66]. В публикациях [46, 67] также говорится о связи износа и акустической эмиссии. Еще в фундаментальной работе В.Д. Кузнецова «Физика твердого тела» рассказывается о генерации звука в опытах по трению медного образца [68]. Когда произошла приработка взаимодействующих поверхностей, и началось интенсивное изнашивание, это привело к появлению звука. В.Д. Кузнецов пришел к выводу, что такое явление обусловлено окислением поверхностного слоя и его износом.

Существуют также гипотезы о том, что причиной упругих колебаний является флуктуирующая сила трения. Флуктуация возникает из-за деформации и адгезии шероховатостей, отделения частиц износа, а также из-за образования и отслоения оксидных пленок [69]. В работе [70] рассматривается вопрос о том, как генерация звука зависит от поверхностной топографии. Выявляется зависимость между возникновением акустического сигнала и условиями окружающей среды, а также коэффициентом трения и скоростью скольжения. Как следствие, при этом было обнаружено удаление металла с поверхности

трения из-за адгезионного взаимодействия. Это означает, что адгезионная компонента являлась основной в акустическом излучении. Причиной возникновения фрикционных автоколебаний в чисто упругой среде, когда динамический и статический коэффициенты трения равны, являются шероховатость и вертикальные колебания ползунка [71]. Тогда при сдвиге взаимодействующих тел происходит флуктуация интегральной силы контактирования.

Кроме того, в работе [72] было показано, что появление звука зависит также и от размера пятна контакта. Данная зависимость обратная, то есть при увеличении этого размера склонность трибосопряжения к генерации звука меньше. Это продемонстрировано на примере автомобильного тормоза. В свою очередь размер самого пятна контакта находится в зависимости от нагрузки и от степени шероховатости сопряженных поверхностей.

Также было выявлено, что фрикционные колебания обусловлены упругими свойствами элементов пары трения, их соединений с другими деталями, а также реологическими характеристиками контакта [73]. Так, при увеличении продолжительности стадии неподвижного контакта наблюдается возрастание фактической площади касания, что, в свою очередь, вызывает увеличение статической силы трения. А при переходе от покоя к движению отмечается скачкообразное уменьшение силы трения. Два этих процесса являются основным проявлением реологии контакта. При увеличении скорости скольжения сила трения уменьшается. Заметим, что это происходит в основном из-за скачка температуры на пятнах контакта.

Таким образом, анализ литературных данных показывает, что трение является сложным многомасштабным динамическим явлением, а его особенности определяются геометрией шероховатости взаимодействующих поверхностей, физико-механическими свойствами материалов трибосопряжения, а также используемым типом нагружения. Генерация звука в процессе трения обусловлена множеством факторов, при этом сами упругие волны играют важную роль при изнашивании взаимодействующих тел.

1.2 Современные подходы к моделированию процессов трения

Во время трения протекает множество процессов на различных масштабах. Поэтому для описания этих процессов разрабатываются специфические модели, как расчетные, так и аналитические, как макроскопические, так и микроскопические.

В макроскопических моделях применяются континуальные методы механики сплошной среды [5, 6]. Примером макроскопического подхода является двумерное моделирование взаимодействия двух твердых тел с регулярным рельефом. Предполагается, что поверхность состоит из треугольных выпуклостей [7]. При этом коэффициент трения и рельеф поверхности остаются неизменными при варьировании масштаба. Во внимание принимаются только механические и геометрические параметры. Данная модель предназначена для того, чтобы вывести зависимость силы трения от нормальной нагрузки, от скорости скольжения, от угла при вершине шероховатостей и от размера, последних вдоль направления скольжения. Известно, что при увеличении скорости скольжения коэффициент трения уменьшается. На основании анализа этих результатов в работе [74] отмечается, что для твердых тел данная зависимость является следствием механического взаимодействия шероховатостей поверхности.

В последнее время активно изучаются динамические процессы при трении, поскольку они являются очень важными, а иногда и детерминирующими при взаимодействии материалов. Эти исследования проводятся также с помощью моделей, которые позволяют анализировать, вследствие чего начинаются колебания в трибосистеме, при каких условиях колебательные режимы становятся стабильными. В частности можно найти критические величины параметров, при которых узел трибосопряжения переходит в другой режим трения и изнашивания [74].

При трении скольжения скорость относительного смещения тел изменяется периодически либо квазипериодически. Все теории,

обосновывающие генерацию колебаний, объясняют появление последних изменением коэффициента трения с течением времени. Одна из гипотез рассматривает в качестве причины появления колебаний ниспадающую нелинейную зависимость коэффициента трения от скорости скольжения [53]. Существует также модель, предполагающая, что скорость не влияет на силу трения. Согласно этой модели, причинами автоколебаний является то, что с изменением относительной скорости скольжения изменяется сила трения, а также то, что разность сил трения покоя и скольжения есть величина отрицательная [75].

Экспериментально была обоснована связь автоколебаний с реологическими явлениями на контакте [76]. Поэтому для выявления и исследования различных динамических режимов трения и изнашивания широко применяются модели, построенные с учетом реологических свойств фрикционного контакта. Для описания всего разнообразия поведения контактирующих материалов используются различные реологические модели. На рис. 1.4 представлены простейшие из них, описывающие наиболее важные реологические свойства поведения реальных материалов [21, 77].

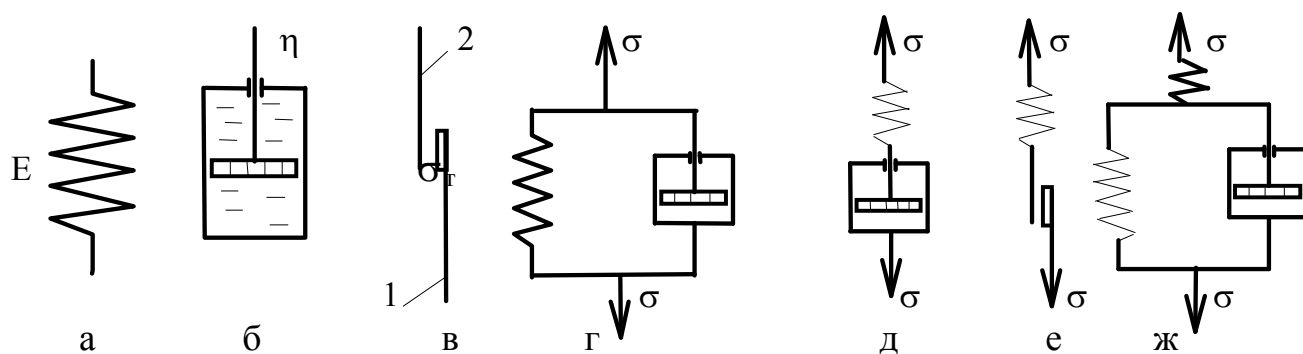


Рисунок 1.4 – Реологические модели

Первая модель (рис. 1.4,а) характеризует идеальную упругость (тело Гука). Для нее связь между напряжением (σ) и деформацией (ϵ) дается линейным законом: $\sigma = E \cdot \epsilon$. Вторая модель (рис. 1.4,б) отражает вязкое течение

(тело Ньютона). Для нее применима формула линейно вязкой жидкости: $\sigma = \eta \dot{\gamma}$. Здесь η – вязкость, а $\dot{\gamma}$ – скорость деформации сдвига. Третья модель (рис. 1.4,в) характеризует идеальный переход к пластической деформации (тело Сен-Венана): $\sigma = \sigma_T \text{sign} \dot{\epsilon}$, где sign – обозначение ступенчато изменяющейся единичной функции, принимающей значение ± 1 в зависимости от знака ее аргумента. Если $\sigma > \sigma_T$, то элементы 1, 2 являются одним целым ($\epsilon = 0$), если $\sigma < \sigma_T$ – элементы скользят относительно друг друга, тело неограниченно пластически деформируется ($\epsilon \rightarrow \infty$). Далее следуют комбинации из первых трех моделей (рис.1.4,з,д,е,ж), отражающие в некотором приближении свойства реальных тел.

Так как нагрузка, скорость скольжения и коэффициент трения оказывают друг на друга взаимное комплексное влияние, то, вызывая фрикционные автоколебания, эти факторы, в зависимости от конкретного узла трения, могут действовать как независимо, так и совместно.

Динамический характер трения проявляется не только на макро-, но и на микроскопическом масштабе. Явление скачкообразного изменения силы трения на микроуровне в литературе принято называть «stick-slip». В случае «stick-slip» относительное движение двух поверхностей происходит не непрерывно, а состоит из последовательных циклов: прилипания (stick) и проскальзывания (slip) [78–80]. Для исследования динамических процессов на микроскопическом уровне, в том числе для изучения явления «stick-slip» используется метод молекулярной динамики [8, 9, 81].

В заключение подчеркнем, что наиболее многообещающим и перспективным при описании шероховатостей поверхностей трения представляется совмещение моделей различных уровней [10–12].

1.3 Метод подвижных клеточных автоматов и его совместное использование с методами континуальной механики

В последние годы активно развивается новый дискретный метод описания поведения твердого тела – метод подвижных клеточных автоматов (МСА), который позволяет моделировать динамические процессы, в том числе при трении, на мезоскопическом масштабном уровне [17–19, 82–88].

Метод подвижных клеточных автоматов является развитием классического подхода клеточных автоматов, позволившим расширить области его применения и включить в круг рассматриваемых проблем задачи, связанные с механическим откликом конденсированных материалов и сред на внешние воздействия (включая процессы деформации и разрушения) [89–91]. Как и в классическом методе клеточных автоматов, в методе МСА моделируемая среда рассматривается как ансамбль структурных элементов (клеточных автоматов) конечного размера, взаимодействующих по определенным правилам и законам. Элементы, составляющие моделируемую среду, характеризуются набором параметров, которые однозначно определяют его состояние. Этими параметрами могут быть, в частности, фазовый состав, температура, теплофизические и механические характеристики материала, составляющего клеточный автомат, параметры межавтоматного взаимодействия. При этом важной проблемой метода является выбор размера отдельного автомата d_i и установление правильного соответствия между свойствами элемента и его масштабом. Общего правила определения величины d_i , позволяющей корректно описывать процессы, происходящие на рассматриваемом масштабном уровне, не существует. Конкретный выбор d_i определяется условиями рассматриваемой задачи. Так, элементы могут составлять отдельные зёрна поликристалла, частицы порошковой смеси, фрагменты блоковых сред или структур и т. д. Отметим, что подобное представление моделируемой среды является общим для всех методов

дискретного подхода в механике.

Принципиальным отличием метода МСА от классических клеточных автоматов является введение предположения о возможности пространственного перемещения дискретных элементов среды за счет взаимодействия с соседями. Следствием способности автомата изменять свое пространственное положение является возможность смены окружения подвижных частиц в результате их перегруппировки. Поскольку в рамках метода клеточных автоматов всякое качественное изменение состояния системы должно реализовываться путем переключения состояния автоматов, для реализации новой способности в методе МСА вводится новый тип состояний – «пространственное отношение пары элементов». Введение данного типа состояний можно рассматривать как расширение существующего в классическом подходе формализма, оперирующего состояниями отдельного автомата. В качестве основного параметра нового типа состояний рассматривается величина перекрытия пары элементов (h_{ij}), определяемая через изменение расстояния между центрами масс взаимодействующих автоматов по сравнению с равновесным расстоянием. Величина h_{ij} определяется следующим выражением (рис. 1.5):

$$h_{ij} = r_{ij} - r_0^{ij}, \quad (1.2)$$

где r_{ij} – расстояние между центрами масс автоматов, $r_0^{ij} = (d_i + d_j)/2$, $d_{i(j)}$ – характерный размер автомата $i(j)$. Областью определения параметра h_{ij} является интервал $[-r_0^{ij}, +\infty)$.

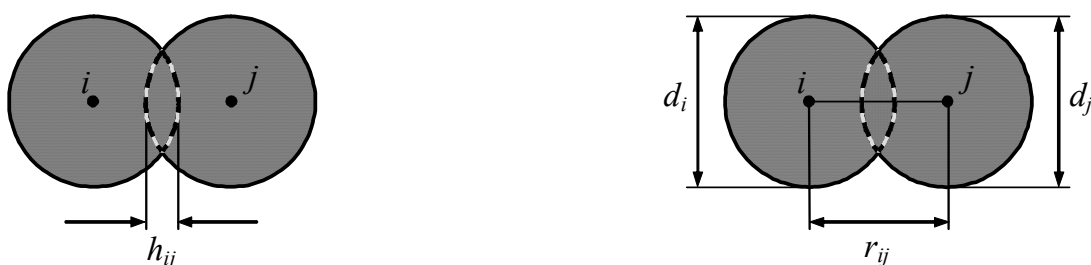


Рисунок 1.5 – Определение параметров пространственного отношения пары клеточных автоматов i и j

Введение нового типа состояний (пространственного отношения пары подвижных автоматов) позволяет рассматривать пару как виртуальный клеточный автомат. В простейшем приближении пара взаимодействующих

автоматов представляет собой бистабильный элемент. При этом два устойчивых стационарных состояния, которыми характеризуется такой бистабильный элемент, ассоциируются соответственно с наличием и отсутствием химической связи между подвижными автоматами. Соответствующие названия состояний – связанное и несвязанное (исходное название на английском языке: *linked* и *unlinked*). В простейшем случае переключение между состояниями происходит при достижении параметром перекрытия h_{ij} некоторого порогового значения. При этом пороговые значения могут быть различными для прямого и обратного переключений и определяются как природой моделируемого материала, так и рассматриваемым масштабным уровнем.

В рамках формализма бистабильных клеточных автоматов уравнение состояния пространственного отношения изолированной пары подвижных клеточных автоматов может быть записано в следующей форме:

$$\frac{dh_{ij}}{dt} = f(h_{ij}) = V_{norm}^{ij} \quad (1.3)$$

Функция f имеет размерность скорости и по смыслу является нормальной компонентой вектора скорости изменения расстояния между центрами масс автоматов V_{norm}^{ij} . Термин «нормальная компонента» обозначает компоненту, направленную вдоль линии, соединяющей центры масс элементов.

Вторая производная межавтоматного перекрытия имеет вид

$$\frac{d^2 h_{ij}}{dt^2} = \frac{df(h_{ij})}{dt} = \frac{dV_{norm}^{ij}}{dt} \quad (1.4)$$

и по смыслу является относительным нормальным ускорением a_{norm}^{ij} в паре $i-j$. В предположении, что моделируемая подвижными клеточными автоматами среда может описываться с позиций классической механики, и для нее справедлив второй закон Ньютона, можно выразить a_{norm}^{ij} через силу нормального взаимодействия моделируемых автоматами фрагментов материала p_{ij} :

$$\frac{d^2 h_{ij}}{dt^2} = a_{norm}^{ij} = \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right) p_{ij}, \quad (1.5)$$

где m_i и m_j – масса клеточных автоматов i и j . Понятие нормальной центральной (действующей на центры масс) силы взаимодействия элементов среды привносится в метод МСА из метода частиц. На основании сделанных выше предположений, очевидно, что p_{ij} – парная сила межавтоматного взаимодействия, то есть p_{ij} зависит только от пространственного отношения пары автоматов $i-j$, контролируемого параметром h_{ij} .

Совокупность пар подвижных клеточных автоматов формирует пространственно распределенную активную среду. На основе модели Винера-Розенблюта можно получить уравнение, описывающее изменение расстояния между подвижными клеточными автоматами, составляющими взаимодействующую пару [14]. Данное уравнение имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 h_{ij}}{dt^2} = a_{norm}^{ij} = & \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right) p_{ij} + \sum_{k \neq j} C(ij, ik) \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_k} \right) p_{ik} + \\ & + \sum_{l \neq i} C(ij, jl) \left(\frac{1}{m_j} + \frac{1}{m_l} \right) p_{jl}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

где $C(ij, ik)$ – коэффициенты переноса возмущения от виртуального клеточного автомата, образованного парой элементов i и k , к соседнему виртуальному автомату, образованному парой подвижных автоматов i и j .

Как видно из (1.6), изменение пространственного параметра h_{ij} , контролирующего состояние отношения пары $i-j$ клеточных автоматов среды, определяется нормальными силами, действующими между центрами масс этих автоматов, а также силами, действующими в парах этих автоматов с окружением. Можно отметить, что представив (1.6) в форме (1.5), можно получить общее выражение для силы пространственного нормального взаимодействия клеточных автоматов i и j среды:

$$F_{norm}^{ij} = m_{ij} \left[\left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right) p_{ij} + \sum_{k \neq j} C(ij, ik) \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_k} \right) p_{ik} + \sum_{l \neq i} C(ij, jl) \left(\frac{1}{m_j} + \frac{1}{m_l} \right) p_{jl} \right], \quad (1.7)$$

где $m_{ij} = (m_i m_j / (m_i + m_j))$.

Выражение (1.7) можно рассматривать как аналог многочастичного потенциала взаимодействия в методе частиц [92–95]. На его основе получено выражение для силы нормального взаимодействия автоматов. Конкретный вид и величина коэффициентов $C(ij, ik)$ и $C(ij, jl)$ определяется свойствами моделируемой среды и может быть найдена, например, из сопоставления выражений (1.6) и (1.7) с существующими математическими моделями изучаемой среды и подгонки оставшихся модельных параметров путем сравнения результатов модельных тестов с экспериментальными данными.

На основании выражения (1.7), а также начальных условий (начальные значения координат \vec{R}_i и скоростей \vec{V}_i центров масс автоматов, а также исходные состояния пространственных отношений пар автоматов и значения h_{ij}) можно записать уравнение движения для центров масс подвижных клеточных автоматов в лабораторной системе координат:

$$\frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \frac{d \vec{V}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \sum_j \vec{F}_{norm}^{ij}, \quad (1.8)$$

где силы взаимодействия автоматов F_{norm}^{ij} вычисляются на основе (1.7).

Помимо нормальных сил, в методе МСА рассматривается возможность тангенциального взаимодействия элементов. Для этого вводится второй контролирующий параметр, связанный с относительным тангенциальным перемещением автоматов:

$$l_{shear}^{ij} = r_{ij} \operatorname{tg}(\gamma_{ij}), \quad (1.9)$$

где γ_{ij} – угол относительного тангенциального смещения (сдвига) в паре подвижных клеточных автоматов i и j .

Для характеристики пространственного отношения пары в методе МСА вводится обобщенный параметр состояния δ_{ij} , являющийся функцией нормального и тангенциального параметров:

$$\delta_{ij} = \psi(h_{ij}, \gamma_{ij}) \quad (1.10)$$

Как видно из (1.10), параметр δ_{ij} учитывает возможность механического взаимодействия клеточных автоматов в нормальном (вдоль линии, соединяющей центры масс) и тангенциальном (перпендикулярном к нему) направлениях. Поэтому обобщенный параметр состояния удобно представить как векторную величину: $\vec{\delta}_{ij} = \vec{h}_{ij} + \vec{l}_{shear}^{ij}$, где \vec{l}_{shear}^{ij} – вектор относительного смещения автоматов в тангенциальном направлении (вектор «сдвигового смещения»). Тогда физической интерпретацией параметра $\vec{\delta}_{ij}$ является вектор смещения клеточного автомата j относительно клеточного автомата i . При этом критерий переключения состояния пары связан с выходом вектора $\vec{\delta}_{ij}$ за пределы некоторой области.

Для обобщенного параметра состояния пары можно провести рассуждение, аналогичное представленному выше для параметра перекрытия автоматов. В результате можно получить обобщенное уравнение относительного перемещения автоматов в паре:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \vec{\delta}_{ij}}{dt^2} = \vec{a}_{ij} = & \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right) \vec{P}_{ij} + \sum_{k \neq j} \bar{C}(ij, ik) \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_k} \right) \vec{P}_{ik} + \\ & + \sum_{l \neq i} \bar{C}(ij, jl) \left(\frac{1}{m_j} + \frac{1}{m_l} \right) \vec{P}_{jl}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

здесь \vec{a}_{ij} – вектор относительного ускорения автоматов пары, \vec{P}_{ij} – вектор парной силы межавтоматного взаимодействия, компонентами которого являются P_{ij} и τ_{ij} (парная сила сопротивления сдвигу, определяемая величиной γ_{ij}), $\bar{C}(ij, ik)$ – матрица коэффициентов распространения возмущений в моделируемой среде. Выражение (1.11) может быть разбито на два уравнения

для компонент h_{ij} и γ_{ij} . Как показано в [96], первое из них (для h_{ij}) совпадает с (1.6), а второе имеет вид:

$$r_{ij} \frac{d^2 \gamma_{ij}}{dt^2} = \frac{dV_{\tan g}^{ij}}{dt} = a_{\tan g}^{ij} = \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j} \right) \tau_{ij}, \quad (1.12)$$

где $V_{\tan g}^{ij}$ – сдвиговая компонента вектора относительной скорости в паре клеточных автоматов i и j , $a_{\tan g}^{ij}$ – относительное тангенциальное ускорение в паре. Сравнение (1.12) и (1.6) показывает, что, в отличие от нормальной силы, сила тангенциального взаимодействия подвижных клеточных автоматов является парной (зависит только от угла сдвига γ_{ij} в данной паре):

$$F_{\tan g}^{ij} = \tau_{ij}. \quad (1.13)$$

Уравнение движения для центра масс подвижного клеточного автомата, полученное с учетом тангенциального взаимодействия элементов, содержит в правой части нормальные и тангенциальные силы:

$$\frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \frac{d\vec{V}_i}{dt} = \frac{1}{m_i} \sum_j \left(\vec{F}_{norm}^{ij} + \vec{F}_{\tan g}^{ij} \right), \quad (1.14)$$

Учет возможности вращения элементов и выражение для вычисления углов поворота заимствован из метода частиц в виде уравнения Эйлера:

$$\hat{J}_i \frac{d^2 \vec{\theta}_i}{dt^2} = \sum_j \vec{K}_{ij}, \quad (1.15)$$

где $\vec{\theta}_i$ – вектор угла поворота, \hat{J}_i – тензор инерции, автомата i , $\vec{K}_{ij} = q_{ij} (\vec{n}_{ij} \times \vec{F}_{\tan g}^{ij})$ – вектор момента тангенциальной силы $\vec{F}_{\tan g}^{ij}$, $\vec{n}_{ij} = (\vec{R}_j - \vec{R}_i) / (q_{ij} + q_{ji})$ – единичный вектор нормали.

Для описания упругого отклика изотропных конденсированных сред в методе МСА используется обобщенный закон Гука [97–100]:

$$\begin{cases} \sigma_\alpha = \varphi \varepsilon_\alpha + (K - \varphi) \varepsilon_{mean} \\ \tau_{\alpha\beta} = \frac{\varphi}{2} \gamma_{\alpha\beta} \end{cases}, \quad (1.16)$$

где индексы α и β нумеруют координатные оси X, Y, Z выбранной системы координат, σ_α и ε_α – диагональные компоненты соответственно тензоров напряжений и деформаций, $\tau_{\alpha\beta}$ ($\gamma_{\alpha\beta}$) – их недиагональные (сдвиговые) компоненты, $\varepsilon_{mean} = (\varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z)/3$ – средняя деформация, K – модуль всестороннего сжатия, φ – некоторый коэффициент, равный удвоенному модулю сдвига $2G$. Очевидно, что закон Гука, записанный в тензорной форме, не может быть непосредственно использован для описания механических процессов в клеточноавтоматной среде, в которой пространственные механические отношения в парах клеточных автоматов определяются векторными параметрами \vec{h}_{ij} , \vec{l}_{shear}^{ij} , \vec{F}_{norm}^{ij} и $\vec{F}_{tan\ g}^{ij}$. Поэтому для использования закона Гука (1.16) при описании взаимодействий подвижных клеточных автоматов необходимо интерпретировать компоненты тензоров напряжения и деформации в терминах векторов сил и смещений. В принятой в работе модели используются следующие приближения:

1. Напряжения на «площадке контакта» автоматов i и j ассоциируются с удельными нормальной и тангенциальной силами взаимодействия:

$$\begin{cases} \vec{F}_{norm}^{ij} = \vec{\sigma}_{ij} S_{ij} \\ \vec{F}_{tan\ g}^{ij} = \vec{\tau}_{ij} S_{ij} \end{cases},$$

где S_{ij} – площадь контакта клеточных автоматов, определяемая их формой и размерами, $\vec{\sigma}_{ij}$ – нормальное к площадке напряжение, $\vec{\tau}_{ij}$ – тангенциальное напряжение. В свою очередь $\vec{\tau}_{ij}$ может быть разбито на две взаимно перпендикулярные компоненты в плоскости, связанной с площадкой S_{ij} .

2. Деформации ассоциируются с нормальным и тангенциальным относительными перемещениями, отнесенными к размеру клеточного автомата. Для нормального взаимодействия автоматов параметр нормальной деформации (или относительного перекрытия) пары можно определить как

$$\xi_{ij} = \frac{h_{ij}}{r_0^{ij}} = \frac{q_{ij} - d_i/2}{(d_i + d_j)/2} + \frac{q_{ji} - d_j/2}{(d_i + d_j)/2} = \xi_{ij} + \xi_{ji},$$

где q_{ij} и q_{ji} – расстояния от центров масс взаимодействующих элементов i и j до площадки их контакта ($q_{ij} + q_{ji} = r_{ij}$). Термин «площадка контакта» (часто используется еще термин «точка контакта») заимствован из метода частиц.

Величина сдвиговой деформации в паре автоматов в общем случае вычисляется путем интегрирования уравнения (1.13). При численном интегрировании приращение величины сдвиговых деформаций γ_{ij} на временном шаге n будет определяться выражением:

$$\Delta\gamma_{ij} = \frac{V_{shear}^{ij} \Delta t}{r_{ij}} = \Delta\gamma_{i(j)} + \Delta\gamma_{j(i)}$$

где V_{shear}^{ij} (скорость сдвига в паре клеточных автоматов i и j) и r_{ij} берутся на шаге n . Следует отметить, что в случае поворота взаимодействующих подвижных клеточных автоматов V_{shear}^{ij} может быть не равна V_{\tan}^{ij} и определяться с учетом угловых скоростей вращения элементов [96].

Возможности метода МСА позволяют осуществлять моделирование процессов накопления необратимых деформаций в конденсированных материалах и средах. В настоящее время не существует единой математической теории неупругого отклика. В механике используются различные модели пластичности, каждая из которых применяется для решения определенного класса задач [97, 101–103]. Описанный выше подход к ассоциированию компонентов тензоров напряжений и деформаций с векторами сил и смещений дает возможность применять в рамках метода МСА различные модели неупругого отклика материала. В настоящей работе использовалось приближение модели малых упруго-пластических деформаций [104], адаптированное к формализму подвижных клеточных автоматов [96].

В рамках деформационной теории пластичности закон, связывающий компоненты тензоров напряжений и деформаций, задается с помощью зависимости $\sigma_{int} = \theta(\varepsilon_{int})$, где σ_{int} и ε_{int} – соответственно интенсивности напряжений и деформаций. Реализация данного подхода в методе МСА дает возможность оперировать четырьмя различными типами механического

отклика подвижных клеточных автоматов (рис. 1.6).

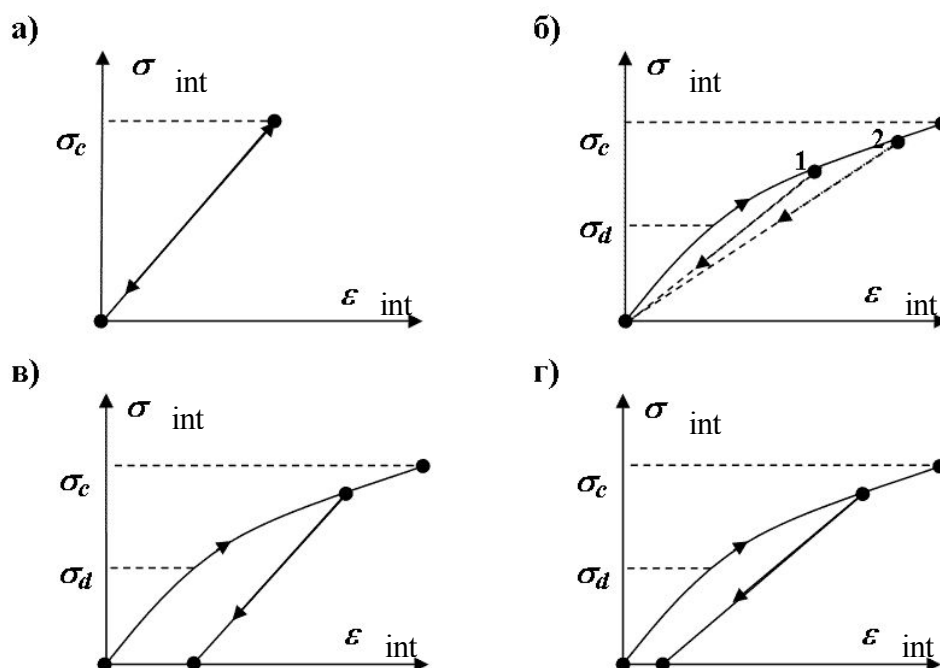


Рисунок 1.6 – Основные типы функции отклика подвижных клеточных автоматов.

В простейшем случае межавтоматное взаимодействие полагается линейно-упругим. При этом сила взаимодействия изолированной пары автоматов линейно зависит от параметра перекрытия (рис. 1.6,а). На рисунке 1.6,б представлен «модифицированный» вариант для материала с деградацией упругих свойств. В отличие от предыдущего случая, где нагрузка и разгрузка идут по одному пути, здесь по достижении некоторого критического значения σ_d начинается понижение упругого модуля, поэтому разгрузка и последующие циклы нагрузки идут с меньшим наклоном. Такое поведение может быть обусловлено накоплением в моделируемом материале повреждений, характерные размеры которых меньше размера клеточного автомата. Зависимость $\sigma_{int}(\varepsilon_{int})$, приведенная на рисунке 1.6,в, соответствует накоплению в паре автоматов необратимой (в частности, пластической) деформации, когда разгрузка идет с исходным упругим модулем. Функция на рисунке 1.6,г является примером комбинации необратимого деформирования и

деградации материала. Следует отметить, что важным свойством метода подвижных клеточных автоматов является его открытость для реализации различных моделей, применяемых для описания неупругого поведения твердого тела. При этом в зависимости от функции отклика клеточного автомата существует возможность описания процессов в твердом теле как на мезомасштабном уровне (с явным учетом анизотропии представительных объемов), так и на макроуровне (в приближении изотропности отклика автоматов) [105].

Рассмотренный выше формализм пространственного механического взаимодействия подвижных клеточных автоматов включает в себя только консервативные (потенциальные) силы. В то же время в реальных системах любые динамические процессы всегда сопровождаются неконсервативными процессами, связанными с диссипацией механической энергии. В рамках метода МСА данные процессы эффективно учитываются введением так называемых сил демпфирования в парах взаимодействующих клеточных автоматов. Эти силы являются функцией относительной скорости автоматов пары и направлены в противоположную к ней сторону. Выражение для демпфирующих сил может быть записано в следующем виде:

$$\begin{cases} \vec{F}_{demp,n}^{ij} = -\vec{F}_{demp,n}^{ji} = -\psi_{norm} \frac{\vec{V}_{norm}^{ij}}{|\vec{V}_{norm}^{ij}|} \\ \vec{F}_{demp,t}^{ij} = -\vec{F}_{demp,t}^{ji} = -\psi_{tang} \frac{\vec{V}_{tang}^{ij}}{|\vec{V}_{tang}^{ij}|} \end{cases},$$

где $\vec{F}_{demp,n}^{ij}$ и $\vec{F}_{demp,t}^{ij}$ – нормальная и тангенциальная демпфирующие силы, действующие на центр масс частицы i . В общем случае физические процессы в моделируемой среде, вызывающие демпфирование в нормальном и тангенциальном направлениях к центрам масс пары $i-j$ частиц, не идентичны, поэтому $\psi_{norm} \neq \psi_{tang}$. Как правило, используются представления ψ_{norm} и ψ_{tang} в виде полиномов:

$$\begin{cases} \Psi_{norm} = \eta_1 |\vec{V}_{norm}^{ij}| + \eta_2 |\vec{V}_{norm}^{ij}|^2 + \dots \\ \Psi_{norm} = \zeta_1 |\vec{V}_{norm}^{ij}| + \zeta_2 |\vec{V}_{norm}^{ij}|^2 + \dots \end{cases},$$

где η_m и ζ_m – так называемые коэффициенты нормальной и тангенциальной вязкости ($m=1,2,\dots$). Коэффициенты η_m и ζ_m являются модельными параметрами, определяемые физикой процессов диссипации и должны вычисляться на основе экспериментальных данных либо других моделей.

Важным преимуществом метода МСА является возможность прямого моделирования процессов разрушения. Такая возможность напрямую вытекает из постулатов метода и связана с переключением между состояниями пары клеточных автоматов. Как отмечалось выше, простейшим критерием переключения между связанным и несвязанным состояниями пары автоматов является достижение обобщенным параметром состояния δ_{ij} некоторого порогового значения. В то же время при моделировании сложных систем в качестве критериев переключения могут использоваться не сами параметры состояния, но некоторые их функции. Среди наиболее простых критериев такого переключения (которое физически интерпретируется как разрушение) можно выделить следующие, связанные с превышением заданного порогового значения:

- 1) относительного расстояния между центрами автоматов;
- 2) удельной силы нормального взаимодействия автоматов;
- 3) либо интенсивности напряжений в паре.

Отметим, что первые два критерия, очевидно, аналогичны первым двум классическим теориям прочности.

При решении задач с использованием метода МСА важным является задание начальных и граничных условий. Используя различные граничные условия (жесткие, упругие, вязкоупругие и т.д.), возможно имитировать разные свойства окружающей среды вокруг моделируемой системы. Задавая дополнительные условия на границах, можно моделировать различные виды механического нагружения (растяжение, сжатие, сдвиг и т.д.).

Следует отметить, что, поскольку в рамках метода МСА дискретные элементы системы сами являются клеточными автоматами, их способность к дискретному изменению состояния может быть реализована при решении комплексных задач механики, в которых деформационные процессы сопровождаются локальными фазовыми превращениями, химическими реакциями и т.д. [82].

Как известно, в процессе разрушения материалов интенсивные деформации, генерация и накопление повреждений, а также перемешивание вещества изначально происходят в достаточно локализованной зоне. Моделирование именно этих процессов вызывает наибольшие трудности в методах механики сплошных сред. В то же время, именно для моделирования таких процессов и разрабатывался метод подвижных клеточных автоматов. Кроме того, при стремлении характерного размера автомата к нулю формализм метода МСА позволяет перейти к классическим соотношениям механики сплошной среды.

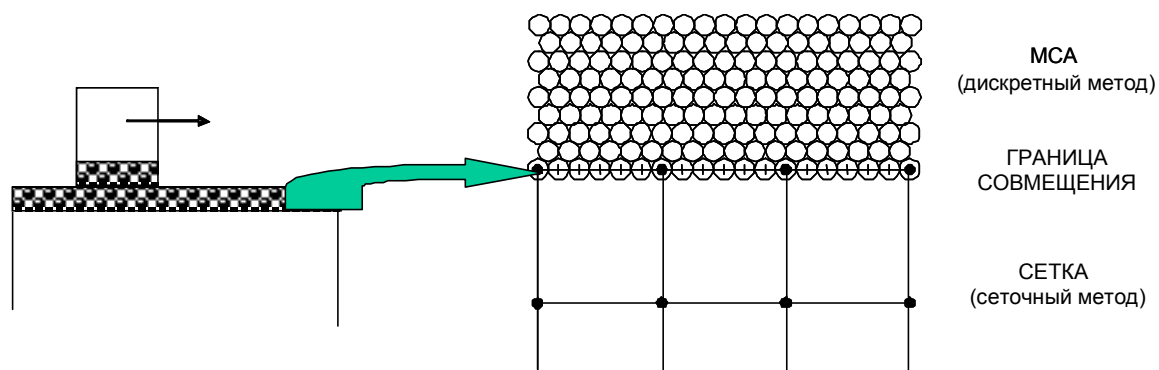


Рисунок 1.7 – Схема, иллюстрирующая принцип совмещения дискретного и континуального описаний

В связи с вышесказанным, с целью повышения эффективности расчётов был разработан подход [106, 107], в котором моделируемый объект представляется состоящим из областей двух типов, один из которых описывается как сплошная, а другой – как дискретная среды (рис. 1.7). При этом для моделирования деформации в континуальной области использовался

конечно-разностный метод решения динамических задач упруго-пластического деформирования сплошных сред (метод Уилкинса), а для моделирования дискретной области – метод подвижных клеточных автоматов. Выбранные методы обладают особенностями, которые несколько облегчают задачу их совмещения. Оба основаны на лагранжевом подходе, то есть рассматривают движение каждой материальной точки относительно фиксированной системы координат, в обоих методах конечные уравнения движения могут быть записаны для точечных масс через действующие на них напряжения или силы. Результатом явилась новая методика, позволяющая объединить преимущества обоих методов.

Метод подвижных клеточных автоматов был изложен выше. Далее будут изложены основные положения конечно-разностного метода Уилкинса, а затем подробно рассмотрен вопрос совмещения используемых методов.

Итак, описание процесса деформирования в континуальной области будем осуществлять путем численного решения системы уравнений, включающей уравнения движения

$$\sigma_{ij,j} = \rho \ddot{u}_i \quad (1.17)$$

уравнение неразрывности

$$\dot{\rho} + \rho \dot{u}_{i,i} = 0 \quad (1.18)$$

уравнение энергии

$$\dot{E} = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij} \quad (1.19)$$

и определяющие соотношения, устанавливающие связь между приращениями напряжений и деформаций, а также геометрические соотношения. Геометрические соотношения связывают компоненты вектора перемещения u_i и тензора деформаций Коши ε_{ij} :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}). \quad (1.20)$$

Упругое поведение среды описывается гипотетическим законом

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + s_{ij}, \quad (1.21)$$

$$\frac{Ds_{ij}}{Dt} = 2G \left(\dot{\varepsilon}_{ij}^e - \frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_{kk}^e \delta_{ij} \right), \quad (1.22)$$

$$\frac{Ds_{ij}}{Dt} = \dot{s}_{ij} - s_{ik} \dot{\omega}_{jk} - s_{jk} \dot{\omega}_{ik}, \quad (1.23)$$

$$\dot{P} = K \frac{\dot{V}}{V}. \quad (1.24)$$

Здесь σ_{ij} – компоненты тензора напряжений; s_{ij} – компоненты девиатора тензора напряжений; $\dot{\omega}_{ij}$ – компоненты тензора скоростей вращения:

$$\dot{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} (\dot{u}_{i,j} - \dot{u}_{j,i}), \quad (1.25)$$

P – среднее давление, K и G – модули сжатия и сдвига соответственно.

Соотношения, используемые для интегрирования уравнений в континуальной области, эквиваленты конечно-разностным уравнениям, приведенным в [108]. Для того чтобы описать особенности реализации условий сопряжения континуальной и дискретной (МСА) областей, нам потребуются лишь выражения для численного интегрирования уравнения движения. Согласно [108] уравнение движения в конечно-разностном виде записывается для узла O в виде:

$$\begin{aligned} \dot{x}_O = \dot{x}'_O - \frac{\Delta t^n}{2\varphi_O} & \left[(\sigma_{xx})_I^n (y_2^n - y_3^n) + (\sigma_{xx})_{II}^n (y_3^n - y_4^n) + \right. \\ & + (\sigma_{xx})_{III}^n (y_4^n - y_1^n) + (\sigma_{xx})_{IV}^n (y_1^n - y_2^n) - (\sigma_{xy})_I^n (x_2^n - x_3^n) - \\ & - (\sigma_{xy})_{II}^n (x_3^n - x_4^n) - (\sigma_{xy})_{III}^n (x_4^n - x_1^n) - (\sigma_{xy})_{IV}^n (x_1^n - x_2^n) \Big], \\ \dot{y}_O = \dot{y}'_O + \frac{\Delta t^n}{2\varphi_O} & \left[(\sigma_{yy})_I^n (x_2^n - x_3^n) + (\sigma_{yy})_{II}^n (x_3^n - x_4^n) + \right. \\ & + (\sigma_{yy})_{III}^n (x_4^n - x_1^n) + (\sigma_{yy})_{IV}^n (x_1^n - x_2^n) - (\sigma_{xy})_I^n (y_2^n - y_3^n) - \\ & - (\sigma_{xy})_{II}^n (y_3^n - y_4^n) - (\sigma_{xy})_{III}^n (y_4^n - y_1^n) - (\sigma_{xy})_{IV}^n (y_1^n - y_2^n) \Big]. \\ x_O^{n+1} = x_O^n + \dot{x}_O \Delta t^{n+1/2}, \quad y_O^{n+1} = y_O^n + \dot{y}_O \Delta t^{n+1/2}. \end{aligned}$$

здесь: $\dot{x}_O = \dot{x}_O^{n+1/2}$, $\dot{x}'_O = \dot{x}_O^{n-1/2}$, $\dot{y}_O = \dot{y}_O^{n+1/2}$, $\dot{y}'_O = \dot{y}_O^{n-1/2}$; 2φ – масса,

соответствующая узлу O , которая вычисляется как среднее по окружающим ячейкам: $\varphi_O = \frac{1}{4} \sum_{k=I,IV} (\rho \cdot A)_k$. Шаблон построения разностного аналога показан на рис. 1.8.

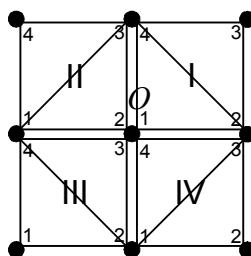


Рисунок 1.8 – Шаблон построения разностного аналога уравнения движения.

Показана нумерация узлов в каждой ячейке и ячеек, окружающих узел O

Из описания представленных методов видно, что в обоих случаях уравнения движения могут быть записаны для некоторых масс через действующие на них напряжения или силы. Эти особенности дают основания полагать, что совмещение данных методов может быть осуществлено достаточно корректно. Для этого моделируемая среда рассматривается состоящей из континуальной и дискретной областей, между которыми определяется некоторая граница сопряжения и полагается, что она принадлежит обеим областям. При этом каждому узлу расчётной сетки, лежащему на границе, ставится в соответствие некоторый автомат (рис. 1.3.5,б). Перемещение граничных узлов вместе с находящимися в них сопряженными автоматами осуществляется в сеточном методе. В общем случае, между двумя соседними узлами сетки, лежащими на границе, может располагаться несколько клеточных автоматов (рис. 1.9,а). Тогда перемещение автоматов, располагающихся между соседними граничными узлами, может быть рассчитано с использованием интерполяции перемещений соответствующих узлов.

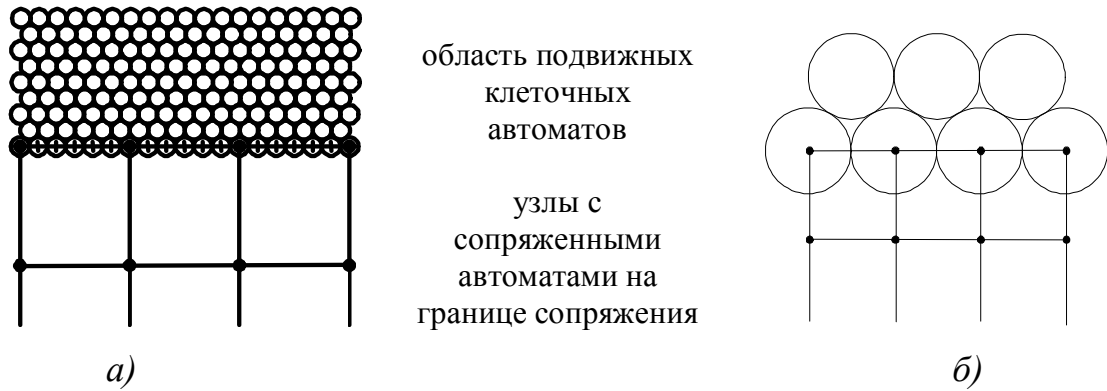


Рисунок 1.9 – Варианты сопряжения континуальной и дискретной расчетных областей для случаев: (а) размер подвижных автоматов меньше шага сетки, (б) размер подвижных автоматов равен шагу сетки

Для обеспечения непрерывности движения на поверхности раздела возможны два подхода. В первом, для каждой из областей записываются свои граничные условия, например, условия свободной поверхности. Затем, после раздельного расчёта скоростей движения граничных узлов и автоматов, производится их корректировка с использованием уравнения сохранения количества движения: $mV = m_a V_a + m_c V_c$. Здесь mV – соответствует совмещенному узлу-автомату, а $m_a V_a$ и $m_c V_c$ – автомату и узлу, соответственно. Пересчитав и совместив, таким образом, скорости и координаты узлов-автоматов можно переходить к расчетам остальных параметров.

Второй подход состоит в том, что согласование движения обеспечивается уже на этапе расчета скорости граничных узлов в континуальной области. Чтобы показать особенности численной реализации такого подхода запишем соответствующие соотношения для уравнения движения в континуальной области в следующем виде:

$$(2\varphi \cdot \ddot{x})_O = -(\sigma_{xx}^I \cdot y_{24}^I + \sigma_{xx}^{II} \cdot y_{31}^{II} + \sigma_{xx}^{III} \cdot y_{42}^{III} + \sigma_{xx}^{IV} \cdot y_{13}^{IV}) + \\ + (\sigma_{xy}^I \cdot x_{24}^I + \sigma_{xy}^{II} \cdot x_{31}^{II} + \sigma_{xy}^{III} \cdot x_{42}^{III} + \sigma_{xy}^{IV} \cdot x_{13}^{IV}),$$

$$(2\varphi \cdot \ddot{y})_O = (\sigma_{yy}^I \cdot x_{24}^I + \sigma_{yy}^{II} \cdot x_{31}^{II} + \sigma_{yy}^{III} \cdot x_{42}^{III} + \sigma_{yy}^{IV} \cdot x_{13}^{IV}) -$$

$$-(\sigma_{xy}^I \cdot y_{24}^I + \sigma_{xy}^{II} \cdot y_{31}^{II} + \sigma_{xy}^{III} \cdot y_{42}^{III} + \sigma_{xy}^{IV} \cdot y_{13}^{IV}),$$

где, $\sigma_{xx}^k, \sigma_{yy}^k, \sigma_{xy}^k$ – компоненты напряжений в соответствующих ячейках; $x_{mn}^k = x_m^k - x_n^k, y_{mn}^k = y_m^k - y_n^k$ и т.д. Верхний индекс означает номер ячейки, а нижний индекс для координат – номер узла (рис. 1.8).

Трактовка состояния в терминах напряжений и деформаций для МСА области отличается от традиционной для континуальных подходов. В связи с этим, для континуальной области перепишем разностное уравнение движения с использованием понятия силы, которое может быть использовано в обеих областях. Отметим, что независимо от трактовки и используемого подхода, – конечно-разностного или конечно-элементного, – при построении разностного аналога уравнений их форма и смысл слагаемых остаются одинаковыми [108–111]. В левой части стоит произведение массы на компоненту ускорения узла расчётной сетки, а справа – компонента равнодействующей силы, приложенной к узлу.

$$m \ddot{x} = \sum_{i=1, N} F_x^i, \quad m \ddot{y} = \sum_{i=1, N} F_y^i, \quad (1.26)$$

$$F_x^i = (-\sigma_{xx}^i \cdot \Delta y^i + \sigma_{xy}^i \cdot \Delta x^i), \quad F_y^i = (\sigma_{yy}^i \cdot \Delta x^i - \sigma_{xy}^i \cdot \Delta y^i)$$

Для всех внутренних узлов континуальной области, выражение для суммарной силы, действующей на центр шаблона, показанного на рис. 1.8, N=4, запишется в виде:

$$\begin{aligned} \sum_{i=I, IV} F_x^i &= -(\sigma_{xx}^I \cdot y_{24}^I + \sigma_{xx}^{II} \cdot y_{31}^{II} + \sigma_{xx}^{III} \cdot y_{42}^{III} + \sigma_{xx}^{IV} \cdot y_{13}^{IV}) + \\ &+ (\sigma_{xy}^I \cdot x_{24}^I + \sigma_{xy}^{II} \cdot x_{31}^{II} + \sigma_{xy}^{III} \cdot x_{42}^{III} + \sigma_{xy}^{IV} \cdot x_{13}^{IV}) \\ \sum_{i=I, IV} F_y^i &= (\sigma_{yy}^I \cdot x_{24}^I + \sigma_{yy}^{II} \cdot x_{31}^{II} + \sigma_{yy}^{III} \cdot x_{42}^{III} + \sigma_{yy}^{IV} \cdot x_{13}^{IV}) - \\ &- (\sigma_{xy}^I \cdot y_{24}^I + \sigma_{xy}^{II} \cdot y_{31}^{II} + \sigma_{xy}^{III} \cdot y_{42}^{III} + \sigma_{xy}^{IV} \cdot y_{13}^{IV}) \end{aligned}$$

Для всех узлов на границе сопряжения слагаемые от недостающих ячеек заменяются силами, действующими на соответствующие автоматы со стороны МСА области. Расчёт движения таких узлов осуществляется исходя из

уравнения (1.26), куда, в зависимости от геометрии границы сопряжения, будут входить силы, полученные в МСА области. Далее, после перемещения автомата, неразрывно связанного с узлом сетки, соответствующее воздействие из области сетки передается во внутреннюю область МСА.

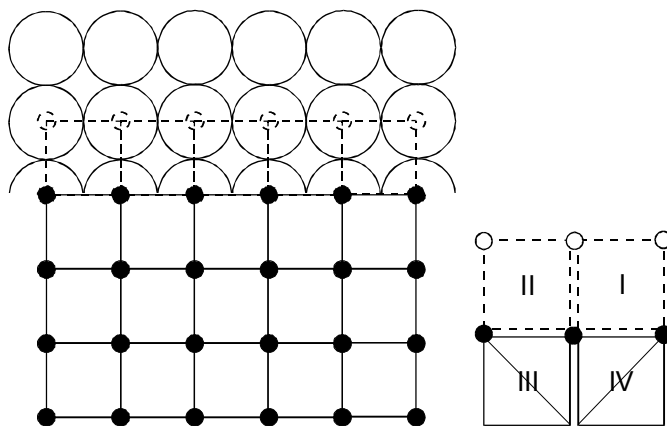


Рисунок 1.10 – Схема совмещения континуальной и дискретной областей и расположения узлов сетки и автоматов в шаблоне конечных разностей

Например, в случае, когда граница сопряжения областей является горизонтальной, как это показано на рис. 1.10, где континуальная область находится в нижней, а дискретная – в верхней части рисунка, можно получить следующие соотношения:

$$\sum_i F_x^i = (-\sigma_{xx}^{\text{III}} \cdot y_{42}^{\text{III}} + \sigma_{xy}^{\text{III}} \cdot x_{42}^{\text{III}}) + (-\sigma_{xx}^{\text{IV}} \cdot y_{13}^{\text{IV}} + \sigma_{xy}^{\text{IV}} \cdot x_{13}^{\text{IV}}) + F'_x$$

$$\sum_i F_y^i = (\sigma_{yy}^{\text{III}} \cdot x_{42}^{\text{III}} - \sigma_{xy}^{\text{III}} \cdot y_{42}^{\text{III}}) + (\sigma_{yy}^{\text{IV}} \cdot x_{13}^{\text{IV}} - \sigma_{xy}^{\text{IV}} \cdot y_{13}^{\text{IV}}) + F'_y,$$

где F'_x , F'_y – компоненты вектора силы, действующего со стороны МСА области на автомат, лежащий на границе раздела.

Следует отметить, что поскольку в таком подходе не рассматривается взаимодействие произвольного узла сетки с автоматами, то в случае моделирования сеточным методом нескольких тел или областей среды все их границы должны быть «покрыты» автоматами.

В случае равенства размера автоматов и шага сетки, временные шаги

интегрирования для обоих методов оказываются практически одинаковыми. Когда размер автоматов меньше шага сетки, то шаг интегрирования по времени в методе МСА будет меньше соответствующего значения для сеточного метода. Поэтому, вообще говоря, величину шага по времени необходимо согласовывать и пользоваться минимальным из значений, рекомендованных каждым методом.

Общий алгоритм совместного расчёта выглядит следующим образом:

1. В континуальной области решается система уравнений (1.17–1.25), осуществляется расчёт напряжённо-деформированного состояния, рассчитываются скорости и координаты.
2. Перед расчётом сил, действующих на узлы, лежащие на границе раздела, осуществляется вызов подпрограммы, реализующей метод МСА. В неё передаются координаты и скорости совмещённых узлов-автоматов с предыдущего шага, а также шаг интегрирования по времени.
3. Пользуясь полученными данными, осуществляется шаг (а в случае мелких автоматов, несколько шагов) интегрирования метода МСА. В результате рассчитываются новые положения и скорости всех автоматов, а также силы, действующие на автоматы, совмещённые с узлами сетки.
4. Новые данные о граничных автоматах (узлах) возвращаются в сеточный метод. После этого в нём осуществляется расчёт согласованного движения граничных узлов-автоматов, определяются их новые координаты.
5. Осуществляется согласование величины нового шага интегрирования по времени.

Отметим, что с использованием методики совмещенного дискретно-континуального моделирования можно оценить точность метода МСА. Для тестирования предложенной методики рассматривалась задача Лэмба – распространение упругих волн от точечного источника на свободной поверхности совмещенной среды, одна часть которой описывалась методом МСА, а другая – методом Уилкинса (который, как известно, имеет второй

порядок точности при аппроксимации управляющих уравнений механики деформируемого твердого тела). Результаты таких расчетов (рис. 1.11) показывают, что даже на таких малых смещениях волновая картина полностью симметрична, и граница совмещения не вносит в нее никаких возмущений [108].

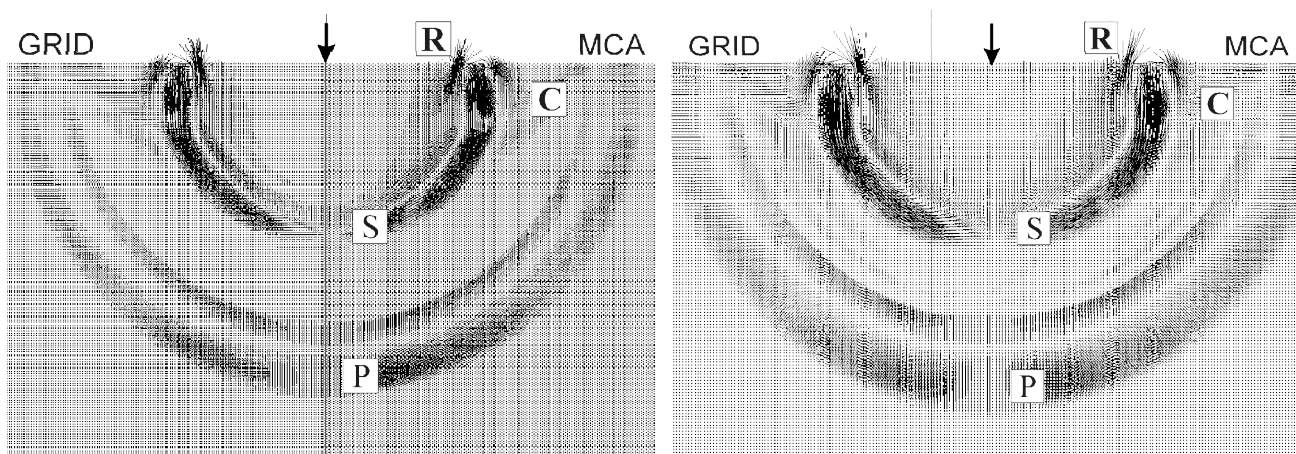


Рисунок 1.11 – тестирование дискретно-континуального подхода на задаче Лэмба. Р – продольная волна, S – поперечная волна, C – коническая волна, R – волна Рэлея. Стрелка – положение точечного источника. Тонкая вертикальная линия – граница совмещения МСА и сетки

Благодаря комплексному подходу к описанию поведения твердого тела метод МСА, в том числе совместно с континуальным подходом, открывает широкие возможности для непосредственного моделирования таких сложных процессов как большие пластические деформации, перемешивание масс, эффекты проникания, возникновение и накопление повреждений. А, как известно, именно эти процессы и имеют место при трении и изнашивании материалов. Особенно актуальными являются возможности метода в описании разрушения материала, позволяющие непосредственно моделировать процесс изнашивания.